備忘録

倉澤 治樹

2006 年 5 月　2021 年 12 月

目 次

1　スキルム力とハートリー・フォック近似

1.1　スピンとアイソスピン

スピンの合成　スピン 1/2 の 2 粒子系の全スピンを考える。粒子 1 のスピンを $\boldsymbol{s}_1$, 粒子 2 のスピンを $\boldsymbol{s}_2$ とする。個々のスピンの固有状態を $|\pm\rangle$ で表す:

$$\boldsymbol{s}^2\,|\pm\rangle = \frac{1}{2}\left(1+\frac{1}{2}\right)|\pm\rangle\,, \quad s_z\,|\pm\rangle = \pm\frac{1}{2}|\pm\rangle$$

粒子 1 のスピン状態が $|\,a\,\rangle$, 粒子 2 のスピン状態が $|\,b\,\rangle$ であるとき $|\,a\,b\,\rangle$ で表すことにする。系の全スピン $\boldsymbol{S}=\boldsymbol{s}_1+\boldsymbol{s}_2$ の固有状態 $|\,S\,M_S\rangle$

$$\boldsymbol{S}^2\,|\,S\,M_S\rangle = S(S+1)\,|\,S\,M_S\rangle\ , \quad S_z\,|\,S\,M_S\rangle = M_S\,|\,S\,M_S\rangle \tag{1.1}$$

を求めよう。$M_S=1$ になる状態は $|\,+\,+\,\rangle$ だけであるから

$$|\,S\!=\!1\ M_S\!=\!1\rangle = |\,+\,+\,\rangle$$

である。両辺に $S_- = (s_-)_1 + (s_-)_2$ を作用させる。一般に角運動量演算子 $J_\pm$ を角運動量の固有状態 $|\,j\,m\,\rangle$ に作用させると

$$J_\pm|\,j\,m\,\rangle = \sqrt{j(j+1)-m(m\pm1)}\,|\,j\,m\!\pm\!1\,\rangle$$

である。したがって

$$S_-|\,S\!=\!1\ M_S\!=\!1\rangle = \sqrt{2}\,|\,S\!=\!1\ M_S\!=\!0\rangle$$

一方, 右辺は

$$\Big((s_-)_1|+\rangle\Big)|+\rangle + |+\rangle\Big((s_-)_2|+\rangle\Big) = |\,-\,+\rangle + |\,+\,-\rangle$$

となるから

$$|\,S\!=\!1\ M_S\!=\!0\rangle = \frac{|\,+\,-\rangle + |\,-\,+\rangle}{\sqrt{2}}$$

$M_T=-1$ となる状態は $|\,-\,-\rangle$ だけであるから

$$|\,S\!=\!1\ M_S\!=\!-1\rangle = |\,-\,-\rangle$$

となる。あるいは, $|\,S\!=\!1\ M_S\!=\!0\rangle$ に再び S_- を作用させてもよい。まとめると

$$|\,S\!=\!1\ M_S\rangle = \begin{cases} |\,+\,+\rangle\,, & M_S=1 \\ \dfrac{|\,+\,-\rangle+|-+\rangle}{\sqrt{2}}\,, & M_S=0 \\ |\,-\,-\rangle\,, & M_S=-1 \end{cases} \tag{1.2}$$

$M_S=0$ となる状態には $|\,S\!=\!0\ M_S\!=\!0\rangle$ もある。これは $|\,S\!=\!1\ M_S\!=\!0\rangle$ と直交するから

$$|\,S\!=\!0\ M_S\!=\!0\rangle = \frac{|\,+\,-\rangle - |\,-\,+\rangle}{\sqrt{2}} \tag{1.3}$$

である。

$S=1$ である 3 つの状態を**スピン 3 重項**, $S=0$ の状態を**スピン 1 重項**という。スピン 3 重項は粒子 1 と 2 の交換に関して対称 (全く変わらない) であるが, スピン 1 重項は反対称 (符号が変わる) である。ここで $\boldsymbol{\sigma}=2\boldsymbol{s}$ とするとき

$$P_\sigma = \frac{1+\boldsymbol{\sigma}_1\!\cdot\!\boldsymbol{\sigma}_2}{2}$$

を考える。

$$\boldsymbol{S}^2 = (\boldsymbol{s}_1 + \boldsymbol{s}_2)^2 = \boldsymbol{s}_1^2 + \boldsymbol{s}_2^2 + 2\boldsymbol{s}_1\cdot\boldsymbol{s}_2 = \frac{3}{2} + \frac{1}{2}\,\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2$$

であるから

$$P_\sigma = \boldsymbol{S}^2 - 1$$

したがって

$$P_\sigma\,|\,S\,M_S\rangle = \Big(S(S+1)-1\Big)\,|\,S\,M_S\rangle = \pm\,|\,S\,M_S\rangle\,, \qquad \begin{cases} S=1\ \text{のとき}\ + \\ S=0\ \text{のとき}\ - \end{cases}$$

これから P_σ は粒子 1 と 2 のスピン状態を交換する。

アイソスピン 原子核は陽子と中性子から構成されている。陽子と中性子はスピン 1/2 のフェルミオンである。陽子の質量と中性子の質量の差は約 1%しかなくほぼ等しい。陽子と中性子は主に電荷などの電磁気的性質により区別される。もし電磁相互作用がなければ陽子と中性子は区別できないであろう。原子核では電磁相互作用よりも核子間に働く**強い相互作用** (strong interaction), つまり**核力** (nuclear force) の方が重要である。そこで, 陽子と中性子を核子という粒子の 2 つの異なる状態と見なす。この 2 つの状態を識別するために, 各核子に補助的な力学変数を付け加える。この力学変数は 2 つの異なる固有値だけをとればよいから, $s = 1/2$ のスピン $\boldsymbol{s}$ と同じ代数的性質を満たす演算子 $\boldsymbol{t}$ を導入する。この $\boldsymbol{t}$ を**荷電スピン**とか**アイソスピン** (isospin) という。もちろん, 2 つの状態を区別するという理由だけではアイソスピンを導入する必然性はない。実は, アイソスピンはスピンと同様に素粒子の基本的性質であり, アイソスピン導入により核力の重要な性質を簡単に表現できる。

さて, t_3 の 2 つの固有値 $m_t = \pm 1/2$ により陽子と中性子を区別する。$\boldsymbol{t}^2$, t_3 の同時固有状態を $|\,m_t\,\rangle$ で表す:

$$\boldsymbol{t}^2\,|\,m_t\rangle = \frac{1}{2}\left(\frac{1}{2}+1\right)|\,m_t\,\rangle\,, \quad t_3\,|\,m_t\,\rangle = m_t\,|\,m_t\,\rangle$$

以下では $|\,m_t{=}1/2\,\rangle$ を陽子状態, $|\,m_t{=}{-1/2}\,\rangle$ を中性子状態に割り当て

$$|\mathrm{p}\rangle = |\,m_t{=}1/2\,\rangle\,, \quad |\mathrm{n}\rangle = |\,m_t{=}{-1/2}\,\rangle$$

と略記する。スピンと同様に

$$P_\tau = \frac{1+\boldsymbol{\tau}_1\cdot\boldsymbol{\tau}_2}{2}\,, \quad \boldsymbol{\tau} = 2\boldsymbol{t}$$

は粒子 1 と 2 のアイソスピン状態を交換する。

$$\tau_\mathrm{p} = \frac{1+\tau_z}{2}\,, \qquad \tau_\mathrm{n} = \frac{1-\tau_z}{2}$$

とすると

$$\tau_\mathrm{p}\,|\mathrm{p}\rangle = |\mathrm{p}\rangle\,, \quad \tau_\mathrm{p}\,|\mathrm{n}\rangle = 0\,, \quad \tau_\mathrm{n}\,|\mathrm{p}\rangle = 0\,, \quad \tau_\mathrm{n}\,|\mathrm{n}\rangle = |\mathrm{n}\rangle$$

あるいは, まとめて

$$\tau_q\,|\,q'\,\rangle = \delta_{qq'}\,|\,q\,\rangle$$

である。τ_q は荷電状態 $|\,q\,\rangle$ に状態を射影する。

核子の状態は軌道運動, スピン, アイソスピンの状態という 3 つの部分からなる。例えば, 運動量 $\boldsymbol{k}$, スピン上向きの陽子の状態は $|\boldsymbol{k}\rangle|+\rangle|\mathrm{p}\rangle$ である。核子の状態を指定するのに必要な全ての量子数をまとめて単に $|\alpha\rangle$ と記す。上の例では $\alpha = \{\boldsymbol{k}, +, \mathrm{p}\}$ である。

核子 1 の状態が $|\alpha\rangle$, 核子 2 の状態が $|\beta\rangle$ である 2 核子系の状態を $|\alpha\,\beta\,\rangle$ で表す。核子 1 と 2 の軌道部分の状態を交換する演算子を P_r とすると

$$P_r P_\sigma P_\tau |\alpha\,\beta\,\rangle = |\beta\,\alpha\,\rangle$$

になるから, 反対称化された 2 核子系の状態は

$$|\alpha\,\beta\,\rangle - |\beta\,\alpha\,\rangle = (1 - P_r P_\sigma P_\tau)\,|\alpha\,\beta\,\rangle$$

と表せる。

1.2　時間反転

ニュートン方程式

$$\frac{d\boldsymbol{p}(t)}{dt} = \boldsymbol{F}(\boldsymbol{r}(t))\,, \quad \boldsymbol{p}(t) = m\frac{d\boldsymbol{r}(t)}{dt}$$

を考える。

$$\overline{\boldsymbol{r}}(t) = \boldsymbol{r}(-t) \tag{1.4}$$

とすると ($s = -t$)

$$\overline{\boldsymbol{p}}(t) = m\frac{d\overline{\boldsymbol{r}}(t)}{dt} = m\frac{ds}{dt}\frac{d\boldsymbol{r}(s)}{ds} = -\boldsymbol{p}(s) = -\boldsymbol{p}(-t) \tag{1.5}$$

$$\frac{d\overline{\boldsymbol{p}}(t)}{dt} = -\frac{d\boldsymbol{p}(s)}{dt} = \frac{d\boldsymbol{p}(s)}{ds} = \boldsymbol{F}(\boldsymbol{r}(s)) = \boldsymbol{F}(\overline{\boldsymbol{r}}(t))$$

したがって, 保存力が作用する場合, 時間を反転した運動 $\overline{\boldsymbol{r}}(t)$ もニュートン方程式の解である。これがニュートン力学での時間反転対称性である。

波動関数の時間変化はシュレディンガー方程式

$$i\hbar\frac{\partial\psi(\boldsymbol{r},t)}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\boldsymbol{\nabla}^2 + V(\boldsymbol{r})\right)\psi(\boldsymbol{r},t)$$

で決まる。ここで

$$\overline{\psi}(\boldsymbol{r},t) \equiv \psi^*(\boldsymbol{r},-t)$$

とすると

$$i\hbar\frac{\partial\overline{\psi}(\boldsymbol{r},t)}{\partial t} = i\hbar\frac{ds}{dt}\frac{\partial\psi^*(\boldsymbol{r},s)}{\partial s} = -i\hbar\frac{\partial\psi^*(\boldsymbol{r},s)}{\partial s} = \left[i\hbar\frac{\partial\psi(\boldsymbol{r},s)}{\partial s}\right]^*$$

であるから

$$i\hbar\frac{\partial\overline{\psi}(\boldsymbol{r},t)}{\partial t} = \left[\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\boldsymbol{\nabla}^2 + V(\boldsymbol{r})\right)\psi(\boldsymbol{r},s)\right]^* = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\boldsymbol{\nabla}^2 + V(\boldsymbol{r})\right)\overline{\psi}(\boldsymbol{r},t)$$

となる。したがって $V(\boldsymbol{r})$ が実数ならば $\overline{\psi}(\boldsymbol{r},t) = \psi^*(\boldsymbol{r},-t)$ もシュレディンガー方程式の解になる。

位置と運動量に期待値を考える。

$$\boldsymbol{r}_{\rm av}(t) = \int d^3r\,\boldsymbol{r}\psi^*(\boldsymbol{r},t)\psi(\boldsymbol{r},t)\,, \quad \overline{\boldsymbol{r}}_{\rm av}(t) = \int d^3r\,\boldsymbol{r}\overline{\psi}^*(\boldsymbol{r},t)\overline{\psi}(\boldsymbol{r},t)$$

$$\boldsymbol{p}_{\rm av}(t) = -i\hbar\int d^3r\,\psi^*(\boldsymbol{r},t)\boldsymbol{\nabla}\psi(\boldsymbol{r},t)\,, \quad \overline{\boldsymbol{p}}_{\rm av}(t) = -i\hbar\int d^3r\,\overline{\psi}^*(\boldsymbol{r},t)\boldsymbol{\nabla}\overline{\psi}(\boldsymbol{r},t)$$

とすると $\overline{\psi}(\boldsymbol{r},t)$ の定義から

$$\overline{\boldsymbol{r}}_{\rm av}(t) = \boldsymbol{r}_{\rm av}(-t) \tag{1.6}$$

である。また, 部分積分を使うと

$$\overline{\boldsymbol{p}}_{\rm av}(t) = i\hbar\int d^3r\,\psi^*(\boldsymbol{r},-t)\boldsymbol{\nabla}\psi(\boldsymbol{r},-t) = -\boldsymbol{p}_{\rm av}(-t) \tag{1.7}$$

である。(1.6) と (1.7) はそれぞれニュートン力学における (1.4) と (1.5) に対応する。したがって, 波動関数 $\psi(\boldsymbol{r},t)$ の時間反転した状態は $\psi^*(\boldsymbol{r},-t)$ で記述される。

波動関数を複素共役に変換するユニタリー演算子 K

$$K\psi(\boldsymbol{r},t) = \psi^*(\boldsymbol{r},t)$$

を考える。c_1, c_2 を定数として $\psi = c_1\psi_1 + c_2\psi_2$ のとき

$$K\left(c_1\psi_1 + c_2\psi_2\right) = c_1^*\psi_1^* + c_2^*\psi_2^* \neq c_1K\psi_1 + c_2K\psi_2$$

であるから, 量子力学で現れる通常の演算子とは異なり, K は線形演算子ではない。ただし $K^2 = 1$ は線形演算子である。

通常の量子力学の表現では, 運動量 $\boldsymbol{p}$ は位置 $\boldsymbol{r}$ の微分

$$\hat{\boldsymbol{p}} = -\,i\hbar\boldsymbol{\nabla}$$

に置き換わる。これは虚数 i を含むから $K\hat{\boldsymbol{p}} = -\,\hat{\boldsymbol{p}}K$ である。あるいは $KK^\dagger = K^\dagger K = 1$ で $K^\dagger$ を定義すると ($K^2 = 1$ であるから $K^\dagger = K$)

$$K\hat{\boldsymbol{p}}K^\dagger = -\,\hat{\boldsymbol{p}}$$

軌道角運動量 $\hat{\boldsymbol{\ell}} = \boldsymbol{r}\times\hat{\boldsymbol{p}}$ も

$$K\hat{\boldsymbol{\ell}}K^\dagger = -\,\hat{\boldsymbol{\ell}}$$

になる。

スピン 1/2 粒子の時間反転演算子 T を考える。スピン演算子 $\hbar\boldsymbol{s} = \hbar\boldsymbol{\sigma}/2$ はパウリ行列

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

で表せる。σ_y の行列要素だけが純虚数であるから

$$K\sigma_xK^\dagger = \sigma_x\,, \quad K\sigma_yK^\dagger = -\,\sigma_y\,, \quad K\sigma_zK^\dagger = \sigma_z$$

である。$\boldsymbol{s}$ も角運動量であるから

$$T\boldsymbol{\sigma}T^\dagger = -\,\boldsymbol{\sigma}$$

を満たす必要がある。したがって, T は単なる複素共役演算子 K ではない。そこで $T = UK$ として, U が σ_x, σ_z だけ符号を変え $\boldsymbol{r}$, $\hat{\boldsymbol{p}}$, σ_y を不変に保つなら

$$T\boldsymbol{r}T^\dagger = \boldsymbol{r}\,, \quad T\hat{\boldsymbol{p}}T^\dagger = -\,\hat{\boldsymbol{p}}\,, \quad T\boldsymbol{\sigma}T^\dagger = -\,\boldsymbol{\sigma}$$

になるから, U としてスピンだけを y 軸のまわりに π 回転させる演算子 $\exp(-i\pi s_y)$ を採用すればよい。$\sigma_y^2 = 1$ を使うと

$$\exp(-i\pi s_y) = \exp(-i\pi\sigma_y/2) = \cos(\pi\sigma_y/2) - i\sin(\pi\sigma_y/2) = \cos(\pi/2) - i\sigma_y\sin(\pi/2) = -\,i\sigma_y$$

であるから

$$T = -\,i\sigma_y K$$

になる。一般に $T = e^{i\theta}\sigma_y K$ (θ は実数) でもよいが, 位相因子 $e^{i\theta}$ には物理的意味がないから, 通常 $T = -\,i\sigma_y K$ を用いる。なお

$$T^2 = i\sigma_y K i\sigma_y K = i\sigma_y (i\sigma_y)^* K^2 = (i\sigma_y)^2 = -1$$

であるから $T^\dagger = -\,T$ である。また, $|\overline{\alpha}\rangle = T|\alpha\rangle$ とすると

$$|\overline{\overline{\alpha}}\rangle = T^2|\alpha\rangle = -\,|\alpha\rangle$$

演算子 F の行列要素

$$\langle\overline{\psi}_1|F|\overline{\psi}_2\rangle\,, \qquad \overline{\psi}_1(\boldsymbol{r}) = T\psi_1(\boldsymbol{r}) = -i\sigma_y\psi_1^*(\boldsymbol{r})\,, \quad \overline{\psi}_2(\boldsymbol{r}) = T\psi_1(\boldsymbol{r}) = -i\sigma_y\psi_2^*(\boldsymbol{r})$$

を考える。ここで ψ は 2 成分のスピノールである。

$$\langle\overline{\psi}_1|F|\overline{\psi}_2\rangle^* = \int d^3r\,\left(\overline{\psi}_1^\dagger(\boldsymbol{r})F\overline{\psi}_2(\boldsymbol{r})\right)^* = \int d^3r\,\left(\psi_1^t\sigma_y F\sigma_y\psi_2^*\right)^* = \int d^3r\,\psi_1^\dagger\sigma_y F^*\sigma_y\psi_2$$

ここで ^{t} は転置を表す。

$$TFT^\dagger = -i\sigma_y KFK^\dagger i\sigma_y = \sigma_y F^*\sigma_y$$

したがって

$$\langle\overline{\psi}_1|F|\overline{\psi}_2\rangle^* = \langle\psi_1|(TFT^\dagger)|\psi_2\rangle$$

あるいは

$$\langle\overline{\psi}_1|F|\overline{\psi}_2\rangle = \langle\psi_1|(TFT^\dagger)|\psi_2\rangle^* = \langle\psi_2|(TFT^\dagger)^\dagger|\psi_1\rangle$$

である。この関係式はよく使う。例えば, 時間反転不変の状態 ($\overline{\psi} = \psi$) における期待値は

$$(TFT^\dagger)^\dagger = -\,F \quad \text{ならば} \quad \langle\psi|F|\psi\rangle = 0$$

である。$\hat{\boldsymbol{p}}$, $\boldsymbol{\ell}$, $\boldsymbol{\sigma}$ は $(TFT^\dagger)^\dagger = -\,F$ を満たす。

A 粒子系の場合, 粒子 i の s_y を $(s_y)_i$ とすると

$$T = \exp\Bigl(-i\pi\sum_{i=1}^{A}(s_y)_i\Bigr)K$$

ここで K は全ての粒子の波動関数を複素共役にする演算子である。

複素共役演算子 K を厳密に定義すると, ここで使った K は

$$K\,|\boldsymbol{r}, m_s\rangle = |\boldsymbol{r}, m_s\rangle$$

である反線形演算子である。ただし $|\boldsymbol{r}, m_s\rangle$ は位置とスピンの固有状態を表す。

1.3　スキルム力

核子 1 と 2 の間で質量 μ の中間子を交換すると, 核子間には (核子間の相対位置を $\boldsymbol{r}_{12} = \boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2$ で表す)

$$v(\boldsymbol{r}_{12}) = v_0\frac{e^{-\lambda r_{12}}}{r_{12}} \times \Bigl(1 + \text{スピン・アイソスピン依存項}\Bigr)\,, \qquad \lambda = \frac{\mu c^2}{\hbar c}$$

が生じる。交換される中間子には π 中間子 ($\mu c^2 \approx 140\,\mathrm{MeV}$), σ 中間子 ($\mu c^2 \approx 500\,\mathrm{MeV}$), ω 中間子 ($\mu c^2 \approx 780\,\mathrm{MeV}$) などあり, 中間子の性質により v_0 の値やスピン・アイソスピン依存項が決まる。共通する点は r 依存性が湯川型 $e^{-\lambda r}/r$ になるため r の増大とともに急激に小さくなることである。v が作用する範囲は $e^{-\lambda r} = e^{-1}$, つまり $r = \lambda^{-1}$ 程度である。したがって, 交換する中間子の質量が大きいほど作用範囲は短い。最も軽い π 中間子でも

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{\hbar c}{\mu c^2} \approx \frac{200\times 10^{-15}\,\mathrm{MeV\,m}}{140\,\mathrm{MeV}} = 1.43\times 10^{-15}\,\mathrm{m}$$

と非常に短い。

ハートリー・フォック方程式を実際に数値計算する上で, フォック項の扱いが問題になる。これを避けるために核力が短距離力である点を生かす。中間子の質量 μ が非常に大きい場合, v は $r_{12} \neq 0$ では 0 になるから $v(\boldsymbol{r}_{12}) \sim \delta(\boldsymbol{r}_{12})$ となるだろう。これをもう少しきちんと扱ってみる。そのために

$$f(r_{12}) = \frac{e^{-\lambda r_{12}}}{r_{12}}$$

を運動量空間に変換する (フーリエ変換)。核子 1, 2 が運動量 $\hbar\boldsymbol{k}_1$, $\hbar\boldsymbol{k}_2$ の状態にあるとき, 波動関数は (反対称化は無視)

$$\frac{1}{(2\pi)^3}\exp(i\boldsymbol{k}_1\cdot\boldsymbol{r}_1 + i\boldsymbol{k}_2\cdot\boldsymbol{r}_2)$$

である。これを重心 $\boldsymbol{R} = (\boldsymbol{r}_1 + \boldsymbol{r}_2)/2$ と相対位置 $\boldsymbol{r}_{12} = \boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2$ で表すと

$$\exp\left(i(\boldsymbol{k}_1 + \boldsymbol{k}_2)\cdot\boldsymbol{R} + i\boldsymbol{k}_{12}\cdot\boldsymbol{r}_{12}\right)\,, \qquad \boldsymbol{k}_{12} = \frac{\boldsymbol{k}_1 - \boldsymbol{k}_2}{2}$$

になる。重心は全運動量 $\hbar(\boldsymbol{k}_1 + \boldsymbol{k}_2)$ で運動し, 2 から見た 1 の相対運動は運動量 $\hbar\boldsymbol{k}_{12}$ で運動する。これから分かるように, 相対位置 $\boldsymbol{r}_{12}$ に対応する運動量演算子 $\hat{\boldsymbol{k}}_{12}$ は

$$-\frac{i}{2}\left(\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{r}_1} - \frac{\partial}{\partial\boldsymbol{r}_2}\right) = -i\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{r}_{12}}$$

で置き換えればよい。以下では, 位置と運動量については固有値と演算子を区別するため演算子には ^ を付ける。

重心運動は相対位置だけによる $v(\boldsymbol{r}_{12})$ では影響されないから相対運動のみ考える。簡単のため添え字 12 は省略する。

$$\begin{aligned}
\langle\boldsymbol{k}|f(\hat{r})|\boldsymbol{k}'\rangle &= \int\frac{d^3r}{(2\pi)^3}\,f(r)\exp(i(\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k})\cdot\boldsymbol{r}) \\
&= \int\frac{d^3r}{(2\pi)^3}\,f(r)\exp(i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r})\,, \qquad \boldsymbol{q} = \boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k} \\
&= \frac{1}{(2\pi)^2}\int_0^\infty dr\,r^2\,f(r)\int_0^\pi d\theta\,\sin\theta\,\exp(iqr\cos\theta)
\end{aligned}$$

$t = \cos\theta$ とすると

$$\int_0^\pi d\theta\,\sin\theta\,\exp(iqr\cos\theta) = \int_{-1}^1 dt\,\exp(iqrt) = \frac{e^{iqr} - e^{-iqr}}{iqr}$$

であるから

$$\begin{aligned}
\langle\boldsymbol{k}|f(\hat{r})|\boldsymbol{k}'\rangle &= \frac{1}{(2\pi)^2 iq}\int_0^\infty dr\,r\,f(r)\left(e^{irq} - e^{-irq}\right) \\
&= \frac{1}{(2\pi)^2 iq}\int_0^\infty dr\,\left(e^{(iq-\lambda)r} - e^{-(iq+\lambda)r}\right) \\
&= \frac{2}{(2\pi)^2}\frac{1}{\lambda^2+q^2}
\end{aligned}$$

$\lambda \gg q$ だとすると

$$\langle \boldsymbol{k}|f(\hat{r})|\boldsymbol{k}'\rangle = \frac{2}{(2\pi)^2\lambda^2}\frac{1}{1+q^2/\lambda^2} = \frac{2}{(2\pi)^2\lambda^2}\left(1-\frac{q^2}{\lambda^2}+\cdots\right)$$

となるから

$$\begin{aligned}
\langle \boldsymbol{r}|f(\hat{r})|\boldsymbol{r}'\rangle &= \int d^3k\, d^3k' \langle \boldsymbol{r}|\boldsymbol{k}\rangle\langle \boldsymbol{k}|f(\hat{r})|\boldsymbol{k}'\rangle\langle \boldsymbol{k}'|\boldsymbol{r}'\rangle \\
&= \frac{2}{(2\pi)^5\lambda^2}\int d^3k\, d^3k' \left(1-\frac{q^2}{\lambda^2}+\cdots\right)\exp(i\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{k}-i\boldsymbol{r}'\cdot\boldsymbol{k}') \\
&= \frac{2}{(2\pi)^5\lambda^2}\int d^3k\, d^3k' \left(1+\frac{1}{\lambda^2}\left(\boldsymbol{\nabla}_{r'}-\boldsymbol{\nabla}_r\right)^2+\cdots\right)\exp(i\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{k}-i\boldsymbol{r}'\cdot\boldsymbol{k}') \\
&= \frac{4\pi}{\lambda^2}\left(1+\frac{1}{\lambda^2}\left(\boldsymbol{\nabla}_{r'}-\boldsymbol{\nabla}_r\right)^2+\cdots\right)\int \frac{d^3k}{(2\pi)^3}\frac{d^3k'}{(2\pi)^2}\exp(i\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{k}-i\boldsymbol{r}'\cdot\boldsymbol{k}') \\
&= \frac{4\pi}{\lambda^2}\left(1+\frac{1}{\lambda^2}\left(\boldsymbol{\nabla}_{r'}-\boldsymbol{\nabla}_r\right)^2+\cdots\right)\delta(\boldsymbol{r})\,\delta(\boldsymbol{r}')
\end{aligned}$$

ところで

$$\langle \boldsymbol{r}|\delta(\hat{\boldsymbol{r}})|\boldsymbol{r}'\rangle = \delta(\boldsymbol{r})\langle \boldsymbol{r}|\boldsymbol{r}'\rangle = \delta(\boldsymbol{r})\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}') = \delta(\boldsymbol{r})\delta(\boldsymbol{r}')$$

$$\langle \boldsymbol{r}|\hat{\boldsymbol{k}}^2\delta(\hat{\boldsymbol{r}})|\boldsymbol{r}'\rangle = -\boldsymbol{\nabla}_r^2\langle \boldsymbol{r}|\delta(\hat{\boldsymbol{r}})|\boldsymbol{r}'\rangle = -\boldsymbol{\nabla}_r^2\delta(\boldsymbol{r})\delta(\boldsymbol{r}')$$

第 2 式で $\boldsymbol{r}$ と $\boldsymbol{r}'$ を入れ換え複素共役をとると

$$\langle \boldsymbol{r}'|\delta(\hat{\boldsymbol{r}})\hat{\boldsymbol{k}}^2|\boldsymbol{r}\rangle^* = \langle \boldsymbol{r}|\hat{\boldsymbol{k}}^2\delta(\hat{\boldsymbol{r}})|\boldsymbol{r}'\rangle = -\boldsymbol{\nabla}_{r'}^2\delta(\boldsymbol{r})\delta(\boldsymbol{r}')$$

$\boldsymbol{\nabla}_r\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}') = -\boldsymbol{\nabla}_{r'}\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')$ であるから

$$\langle \boldsymbol{r}|\hat{\boldsymbol{k}}\cdot\delta(\hat{\boldsymbol{r}})\hat{\boldsymbol{k}}|\boldsymbol{r}'\rangle = -\boldsymbol{\nabla}_r\delta(\boldsymbol{r})\cdot\boldsymbol{\nabla}_r\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}') = \boldsymbol{\nabla}_r\delta(\boldsymbol{r})\cdot\boldsymbol{\nabla}_{r'}\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}') = \boldsymbol{\nabla}_r\cdot\boldsymbol{\nabla}_{r'}\delta(\boldsymbol{r})\delta(\boldsymbol{r}')$$

したがって

$$\langle \boldsymbol{r}|f(\hat{r})|\boldsymbol{r}'\rangle = \frac{4\pi}{\lambda^2}\langle \boldsymbol{r}|\left(\delta(\hat{\boldsymbol{r}})-\frac{1}{\lambda^2}\left(\hat{\boldsymbol{k}}^2\delta(\hat{\boldsymbol{r}})+\delta(\hat{\boldsymbol{r}})\hat{\boldsymbol{k}}^2+2\hat{\boldsymbol{k}}\cdot\delta(\hat{\boldsymbol{r}})\hat{\boldsymbol{k}}\right)\right)|\boldsymbol{r}'\rangle$$

つまり

$$f(\hat{r}) = \frac{4\pi}{\lambda^2}\left(\delta(\hat{\boldsymbol{r}})-\frac{1}{\lambda^2}\left(\hat{\boldsymbol{k}}^2\delta(\hat{\boldsymbol{r}})+\delta(\hat{\boldsymbol{r}})\hat{\boldsymbol{k}}^2+2\hat{\boldsymbol{k}}\cdot\delta(\hat{\boldsymbol{r}})\hat{\boldsymbol{k}}\right)\right)$$

となる。

以上の結果を一般化して, 原子核中の核子間に作用する相互作用として

$$\begin{aligned}
v(1,2) = t_0\left(1+x_0P_\sigma\right)\delta(\hat{\boldsymbol{r}}_1-\hat{\boldsymbol{r}}_2) &+ \frac{t_1}{2}\left(\delta(\hat{\boldsymbol{r}}_1-\hat{\boldsymbol{r}}_2)\hat{\boldsymbol{k}}_{12}^2+\hat{\boldsymbol{k}}_{12}^2\delta(\hat{\boldsymbol{r}}_1-\hat{\boldsymbol{r}}_2)\right)+t_2\hat{\boldsymbol{k}}_{12}\cdot\delta(\hat{\boldsymbol{r}}_1-\hat{\boldsymbol{r}}_2)\hat{\boldsymbol{k}}_{12} \\
&+ iW_0\left(\boldsymbol{\sigma}_1+\boldsymbol{\sigma}_2\right)\cdot\hat{\boldsymbol{k}}_{12}\times\delta(\hat{\boldsymbol{r}}_1-\hat{\boldsymbol{r}}_2)\hat{\boldsymbol{k}}_{12}+\frac{t_3}{6}\left(1+P_\sigma\right)\delta(\hat{\boldsymbol{r}}_1-\hat{\boldsymbol{r}}_2)\rho((\hat{\boldsymbol{r}}_1+\hat{\boldsymbol{r}}_2)/2)
\end{aligned}$$

ただし

$$\hat{\boldsymbol{k}}_{12} = \frac{\hat{\boldsymbol{k}}_1-\hat{\boldsymbol{k}}_2}{2}, \quad P_\sigma = \frac{1+\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2}{2}$$

を採用する。これをスキルム (Skyrme) 力という。この相互作用は t_0, t_1, t_2, t_3, x_0, W_0 の 6 つパラメータを含む。これらは原子核の結合エネルギーと大きさを再現するように決める。W_0 の項は原子核に特徴的な強いスピン・軌道力を再現するために必要である。また, 密度 ρ に依存する項は原子核中での多体効果を現象論的に取り入れたものと考えられているが, 実際問題として, この項がないと $\delta(\boldsymbol{r})$ 型の簡単な相互作用では原子核を安定な束縛系にすることができない。

1.4　エネルギー期待値

核子間の相互作用がスキルム力であるとき, ハートリー・フォック基底状態 $|\,\rangle$ におけるエネルギー期待値

$$E = \langle\,|\sum_i \frac{\hbar^2\hat{\boldsymbol{k}}_i^2}{2m} + \frac{1}{2}\sum_{ij} v(i,j)|\,\rangle = \frac{\hbar^2}{2m}\sum_i \langle\, i\,|\hat{\boldsymbol{k}}^2|\,i\,\rangle + \frac{1}{2}\sum_{ij}\langle\, ij\,|\bar{v}(1,2)|\,ij\,\rangle$$

を求める。ここで $|\,ij\,\rangle$ は核子 1 が状態 $|\,i\,\rangle$, 核子 2 が状態 $|\,j\,\rangle$ にある状態, $\bar{v}$ は反対称化された相互作用

$$\bar{v}(1,2) = v(1,2)\,(1 - P_r P_\sigma P_\tau)$$

である。スキルム力の場合, E は陽子, 中性子それぞれの核子密度 $\rho_q(\boldsymbol{r})$, 運動エネルギー密度 $\tau_q(\boldsymbol{r})$, スピンカレント $\boldsymbol{J}_q(\boldsymbol{r})$ で表せる:

$$\begin{aligned}
\rho_q(\boldsymbol{r}) &= \sum_i \langle\, i\,|\delta(\boldsymbol{r}-\hat{\boldsymbol{r}})\,\tau_q|\,i\,\rangle = \sum_i\sum_\sigma |\phi_i(\boldsymbol{r}\sigma q)|^2 \\
\tau_q(\boldsymbol{r}) &= \sum_i \langle\, i\,|\,\hat{\boldsymbol{k}}\,\delta(\boldsymbol{r}-\hat{\boldsymbol{r}})\cdot\hat{\boldsymbol{k}}\,\tau_q|\,i\,\rangle = \sum_i\sum_\sigma |\boldsymbol{\nabla}\phi_i(\boldsymbol{r}\sigma q)|^2 \\
\boldsymbol{J}_q(\boldsymbol{r}) &= \sum_i \langle\, i\,|\delta(\boldsymbol{r}-\hat{\boldsymbol{r}})\hat{\boldsymbol{k}}\times\boldsymbol{\sigma}\tau_q|\,i\,\rangle = -\,i\sum_i\sum_{\sigma\sigma'} \phi_i^*(\boldsymbol{r}\sigma q)\boldsymbol{\nabla}\phi_i(\boldsymbol{r}\sigma' q)\times\langle\sigma|\boldsymbol{\sigma}|\sigma'\rangle
\end{aligned}$$

ただし $\phi_i(\boldsymbol{r}\sigma q) = \langle \boldsymbol{r}\sigma q|\,i\,\rangle$ は 1 粒子状態 i の波動関数である。

HF 基底状態 $|\,\rangle$ は時間反転に対して不変であるとする。時間反転演算子を T とすると

$$T\,|\,\rangle = |\,\rangle$$

である。したがって, ある演算子 F の期待値は

$$\langle\,|F|\,\rangle = (\langle\,|T)\;F\;\left(T^{-1}|\,\rangle\right) = \langle\,|\,\left(TFT^{-1}\right)\,|\,\rangle^* \tag{1.8}$$

を満たす。なお, 時間反転すればスピンと運動量の向きは逆転するが, 位置は不変である:

$$T\,\hat{\boldsymbol{k}}\,T^{-1} = -\,\hat{\boldsymbol{k}}\,, \qquad T\,\boldsymbol{\sigma}\,T^{-1} = -\,\boldsymbol{\sigma}\,, \qquad T\,\hat{\boldsymbol{r}}\,T^{-1} = \hat{\boldsymbol{r}}$$

この性質から

$$\begin{aligned}
\sum_i \langle\, i\,|\,\delta(\boldsymbol{r}-\hat{\boldsymbol{r}})\hat{\boldsymbol{k}}\,\tau_q|\,i\,\rangle &= \sum_i \langle\, i|\left(T\delta(\boldsymbol{r}-\hat{\boldsymbol{r}})\hat{\boldsymbol{k}}\,\tau_q T^{-1}\right)|\,i\,\rangle^* \\
&= -\sum_i \langle\, i\,|\,\hat{\boldsymbol{k}}\,\delta(\boldsymbol{r}-\hat{\boldsymbol{r}})\,\tau_q|\,i\,\rangle \\
&= -\sum_i \langle\, i\,|\left(\hat{\boldsymbol{k}}\,\delta(\boldsymbol{r}-\hat{\boldsymbol{r}})\right)\tau_q|\,i\,\rangle - \sum_i \langle\, i\,|\,\delta(\boldsymbol{r}-\hat{\boldsymbol{r}})\,\hat{\boldsymbol{k}}\,\tau_q|\,i\,\rangle \\
&= -\frac{1}{2}\sum_i \langle\, i\,|\left(\hat{\boldsymbol{k}}\,\delta(\boldsymbol{r}-\hat{\boldsymbol{r}})\right)\tau_q|\,i\,\rangle
\end{aligned}$$

ところで

$$\left(\hat{\boldsymbol{k}}\,\delta(\boldsymbol{r}-\hat{\boldsymbol{r}})\right) = -i\frac{\partial\,\delta(\boldsymbol{r}-\hat{\boldsymbol{r}})}{\partial\hat{\boldsymbol{r}}} = +i\frac{\partial\,\delta(\boldsymbol{r}-\hat{\boldsymbol{r}})}{\partial\boldsymbol{r}} = i\boldsymbol{\nabla}\delta(\boldsymbol{r}-\hat{\boldsymbol{r}})$$

であるから

$$\sum_i \langle\, i\,|\,\delta(\boldsymbol{r}-\hat{\boldsymbol{r}})\hat{\boldsymbol{k}}\,\tau_q|\,i\,\rangle = -\frac{i}{2}\sum_i \langle\, i\,|\,\boldsymbol{\nabla}\delta(\boldsymbol{r}-\hat{\boldsymbol{r}})\,\tau_q|\,i\,\rangle$$

$\boldsymbol{\nabla}$ はヒルベルト空間の演算子ではないからブラ $\langle\, i\,|$ の前にだしてもよい。したがって

$$\sum_i \langle\, i\,|\,\delta(\boldsymbol{r}-\hat{\boldsymbol{r}})\hat{\boldsymbol{k}}\,\tau_q|\,i\,\rangle = -\sum_i \langle\, i\,|\,\hat{\boldsymbol{k}}\,\delta(\boldsymbol{r}-\hat{\boldsymbol{r}})\,\tau_q|\,i\,\rangle = -\frac{i}{2}\boldsymbol{\nabla}\rho_q(\boldsymbol{r}) \tag{1.9}$$

次に

$$\begin{aligned}\tau_q(\boldsymbol{r}) = \sum_i \langle\, i\,|\,\hat{\boldsymbol{k}}\,\delta(\boldsymbol{r}-\hat{\boldsymbol{r}})\cdot\hat{\boldsymbol{k}}\,\tau_q|\,i\,\rangle &= \sum_i \langle\, i\,|\,\Big(\hat{\boldsymbol{k}}\,\delta(\boldsymbol{r}-\hat{\boldsymbol{r}})\Big)\cdot\hat{\boldsymbol{k}}\,\tau_q + \delta(\boldsymbol{r}-\hat{\boldsymbol{r}})\,\hat{\boldsymbol{k}}^2\tau_q|\,i\,\rangle \\ &= \sum_i \langle\, i\,|\,i\boldsymbol{\nabla}\delta(\boldsymbol{r}-\hat{\boldsymbol{r}})\cdot\hat{\boldsymbol{k}}\,\tau_q + \delta(\boldsymbol{r}-\hat{\boldsymbol{r}})\,\hat{\boldsymbol{k}}^2\tau_q|\,i\,\rangle\end{aligned}$$

であるから

$$\sum_i \langle\, i\,|\delta(\boldsymbol{r}-\hat{\boldsymbol{r}})\,\hat{\boldsymbol{k}}^2\tau_q|\,i\,\rangle = \tau_q(\boldsymbol{r}) - i\boldsymbol{\nabla}\cdot\sum_i \langle\, i\,|\,\delta(\boldsymbol{r}-\hat{\boldsymbol{r}})\hat{\boldsymbol{k}}\,\tau_q|\,i\,\rangle = \tau_q(\boldsymbol{r}) - \frac{1}{2}\boldsymbol{\nabla}^2\rho_q(\boldsymbol{r}) \tag{1.10}$$

スピン密度は

$$\sum_i \langle\, i\,|\delta(\boldsymbol{r}-\hat{\boldsymbol{r}})\tau_q\boldsymbol{\sigma}\,|\,i\,\rangle = \sum_i \langle\, i\,|\,\big(T\delta(\boldsymbol{r}-\hat{\boldsymbol{r}})\tau_q\boldsymbol{\sigma}T^{-1}\big)\,|\,i\,\rangle^* = -\sum_i \langle\, i\,|\delta(\boldsymbol{r}-\hat{\boldsymbol{r}})\tau_q\boldsymbol{\sigma}\,|\,i\,\rangle = 0 \tag{1.11}$$

である。

アイソスピンの状態について $\langle\, q_iq_j\,|P_\tau|\,q_iq_j\,\rangle$ が必要になるが, P_τ の定義から

$$\langle\, q_iq_j\,|P_\tau|\,q_iq_j\,\rangle = \frac{1}{2}\left(\langle\, q_iq_j\,|\,q_iq_j\,\rangle + \langle\, q_i\,|\boldsymbol{\tau}|\,q_i\,\rangle\cdot\langle\, q_j\,|\boldsymbol{\tau}|\,q_j\,\rangle\right)$$

$\langle\, q\,|\boldsymbol{\tau}|\,q\,\rangle$ はパウリのスピン行列の対角要素であるから, 0 でないものは τ_z だけである。したがって P_τ の内積 $\boldsymbol{\tau}_1\cdot\boldsymbol{\tau}_2$ を z 成分の積 $\tau_{1z}\tau_{2z}$ で置き換えてよいから

$$P_\tau = \frac{1+\tau_{1z}\tau_{2z}}{2} = \frac{1+\tau_{1z}}{2}\frac{1+\tau_{2z}}{2} + \frac{1-\tau_{1z}}{2}\frac{1-\tau_{2z}}{2} = \tau_{1p}\tau_{2p} + \tau_{1n}\tau_{2n} = \sum_q \tau_{1q}\tau_{2q}$$

になる。

$\tau_q(\boldsymbol{r})$ を積分すると

$$\int d^3r\,\tau_q(\boldsymbol{r}) = \sum_i \langle\, i\,|\,\hat{\boldsymbol{k}}\int d^3r\,\delta(\boldsymbol{r}-\hat{\boldsymbol{r}})\cdot\hat{\boldsymbol{k}}\,\tau_q|\,i\,\rangle = \sum_i \langle\, i\,|\,\hat{\boldsymbol{k}}^2\tau_q|\,i\,\rangle$$

であり $\tau_{\rm p}+\tau_{\rm n}=1$ であるから

$$\sum_i \langle\, i\,|\hat{\boldsymbol{k}}^2|\,i\,\rangle = \int d^3r\,\Big(\tau_{\rm p}(\boldsymbol{r}) + \tau_{\rm n}(\boldsymbol{r})\Big)$$

t_0 項

$$V_0 = \frac{t_0}{2}\sum_{ij}\langle\, ij\,|\,(1+x_0P_\sigma)\,\delta(\hat{\boldsymbol{r}}_1-\hat{\boldsymbol{r}}_2)\,(1-P_rP_\sigma P_\tau)\,|\,ij\,\rangle$$

を求める。2 粒子系の状態 $|\,ij\,\rangle$ を重心と相対運動で表したとき, 相対運動の波動関数の相対軌道角運動量が L である部分

$$R(r_{12})\,Y_{LM}(\theta_{12},\varphi_{12})\,,\quad R(r_{12}) \propto r_{12}^L\left(1+a_L\,r_{12}^2+\cdots\right)$$

は, 遠心力のため $L \neq 0$ のとき $R(r_{12}=0)=0$ になる。したがって, V_0 に寄与するのは $L=0$ のみである。軌道部分の状態について粒子 1 と 2 を交換すると $\boldsymbol{r}_1 \to \boldsymbol{r}_2$, $\boldsymbol{r}_2 \to \boldsymbol{r}_1$ つまり $\boldsymbol{r}_{12} \to -\boldsymbol{r}_{12}$ であるから

$$P_r R(r_{12})\, Y_{LM}(\theta_{12},\varphi_{12}) = (-)^L R(r_{12})\, Y_{LM}(\theta_{12},\varphi_{12})$$

になる。$L=0$ だけを扱う場合には $P_r=1$ としてよい。これから

$$\begin{aligned}
V_0 &= \frac{t_0}{2}\sum_{ij}\langle\, i\, j\,|\delta(\hat{\boldsymbol{r}}_1-\hat{\boldsymbol{r}}_2)\,(1+x_0P_\sigma)\,(1-P_\tau P_\sigma)\,|\, i\, j\,\rangle \\
&= \frac{t_0}{2}\sum_{ij}\langle\, i\, j\,|\delta(\hat{\boldsymbol{r}}_1-\hat{\boldsymbol{r}}_2)\left(1+\frac{x_0}{2}-\left(x_0+\frac{1}{2}\right)P_\tau+\frac{x_0-P_\tau}{2}\,\boldsymbol{\sigma}_1\!\cdot\!\boldsymbol{\sigma}_2\right)|\, i\, j\,\rangle
\end{aligned}$$

デルタ関数 $\delta(\hat{\boldsymbol{r}}_1-\hat{\boldsymbol{r}}_2)$ は

$$\delta(\hat{\boldsymbol{r}}_1-\hat{\boldsymbol{r}}_2)=\int d^3r\,\delta(\boldsymbol{r}-\hat{\boldsymbol{r}}_1)\,\delta(\boldsymbol{r}-\hat{\boldsymbol{r}}_2)$$

と表せるから, 例えば

$$\begin{aligned}
\sum_{ij}\langle\, i\, j\,|\delta(\hat{\boldsymbol{r}}_1-\hat{\boldsymbol{r}}_2)P_\tau|\, i\, j\,\rangle &= \int d^3r\sum_{ij}\langle\, i\, j\,|\delta(\boldsymbol{r}-\hat{\boldsymbol{r}}_1)\,\delta(\boldsymbol{r}-\hat{\boldsymbol{r}}_2)\sum_q \tau_{1q}\tau_{2q}\,|\, i\, j\,\rangle \\
&= \sum_q\int d^3r\sum_{ij}\langle\, i\,|\delta(\boldsymbol{r}-\hat{\boldsymbol{r}})\tau_q|\, i\,\rangle\langle\, j\,|\delta(\boldsymbol{r}-\hat{\boldsymbol{r}})\tau_q|\, j\,\rangle \\
&= \sum_q\int d^3r\,\rho_q^2(\boldsymbol{r})
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\sum_{ij}\langle\, i\, j\,|\delta(\hat{\boldsymbol{r}}_1-\hat{\boldsymbol{r}}_2)\,\boldsymbol{\sigma}_1\!\cdot\!\boldsymbol{\sigma}_2|\, i\, j\,\rangle &= \int d^3r\sum_{ij}\langle\, i\, j\,|\delta(\boldsymbol{r}-\hat{\boldsymbol{r}}_1)\,\delta(\boldsymbol{r}-\hat{\boldsymbol{r}}_2)\,\boldsymbol{\sigma}_1\!\cdot\!\boldsymbol{\sigma}_2|\, i\, j\,\rangle \\
&= \int d^3r\sum_{ij}\langle\, i\,|\delta(\boldsymbol{r}-\hat{\boldsymbol{r}})\boldsymbol{\sigma}|\, i\,\rangle\!\cdot\!\langle\, j\,|\delta(\boldsymbol{r}-\hat{\boldsymbol{r}})\boldsymbol{\sigma}|\, j\,\rangle = 0
\end{aligned}$$

である。他の項も同様にすると

$$V_0=\frac{t_0}{2}\int d^3r\left(\left(1+\frac{x_0}{2}\right)\rho^2-\left(x_0+\frac{1}{2}\right)\sum_q\rho_q^2\right)$$

t_1 項

$$V_1=\frac{t_1}{16}\sum_{ij}\langle ij\,|\left(\delta(\hat{\boldsymbol{r}}_1-\hat{\boldsymbol{r}}_2)\left(\hat{\boldsymbol{k}}_1-\hat{\boldsymbol{k}}_2\right)^2+\left(\hat{\boldsymbol{k}}_1-\hat{\boldsymbol{k}}_2\right)^2\delta(\hat{\boldsymbol{r}}_1-\hat{\boldsymbol{r}}_2)\right)(1-P_rP_\sigma P_\tau)\,|\, ij\,\rangle$$

この場合も相対軌道角運動量は $L=0$ だけ寄与するから $P_r=1$ としてよい。HF 基底状態 $|\,\rangle$ は時間反転不変であるから

$$\begin{aligned}
&\sum_{ij}\langle ij\,|\left(\hat{\boldsymbol{k}}_1-\hat{\boldsymbol{k}}_2\right)^2\delta(\hat{\boldsymbol{r}}_1-\hat{\boldsymbol{r}}_2)\,(1-P_\sigma P_\tau)\,|\, ij\,\rangle \\
&=\sum_{ij}\langle ij\,|\left(T\left(\hat{\boldsymbol{k}}_1-\hat{\boldsymbol{k}}_2\right)^2\delta(\hat{\boldsymbol{r}}_1-\hat{\boldsymbol{r}}_2)T^{-1}\right)(1-P_\sigma P_\tau)\,|\, ij\,\rangle^* \\
&=\sum_{ij}\langle ij\,|\left(\hat{\boldsymbol{k}}_1-\hat{\boldsymbol{k}}_2\right)^2\delta(\hat{\boldsymbol{r}}_1-\hat{\boldsymbol{r}}_2)\,(1-P_\sigma P_\tau)\,|\, ij\,\rangle^* \\
&=\sum_{ij}\langle ij\,|\delta(\hat{\boldsymbol{r}}_1-\hat{\boldsymbol{r}}_2)\left(\hat{\boldsymbol{k}}_1-\hat{\boldsymbol{k}}_2\right)^2(1-P_\sigma P_\tau)\,|\, ij\,\rangle
\end{aligned}$$

したがって

$$\begin{aligned}
V_1 &= \frac{t_1}{8}\sum_{ij}\langle\, i\, j\, |\delta(\hat{\boldsymbol{r}}_1-\hat{\boldsymbol{r}}_2)\left(\hat{\boldsymbol{k}}_1-\hat{\boldsymbol{k}}_2\right)^2\left(1-P_\tau\frac{1+\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2}{2}\right)|\, i\, j\,\rangle \\
&= \frac{t_1}{4}\sum_{ij}\langle\, i\, j\, |\delta(\hat{\boldsymbol{r}}_1-\hat{\boldsymbol{r}}_2)\left(\hat{\boldsymbol{k}}_1^2-\hat{\boldsymbol{k}}_1\cdot\hat{\boldsymbol{k}}_2\right)\left(1-P_\tau\frac{1+\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2}{2}\right)|\, i\, j\,\rangle \\
&= \frac{t_1}{4}\int d^3r\sum_{ij}\langle\, i\, j\,|\,\delta(\boldsymbol{r}-\hat{\boldsymbol{r}}_1)\,\delta(\boldsymbol{r}-\hat{\boldsymbol{r}}_2)\left(\hat{\boldsymbol{k}}_1^2-\hat{\boldsymbol{k}}_1\cdot\hat{\boldsymbol{k}}_2\right)\left(1-P_\tau\frac{1+\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2}{2}\right)|\, i\, j\,\rangle \\
&= V_{11}+V_{12}+V_{13}
\end{aligned}$$

ただし

$$\begin{aligned}
V_{11} &= \frac{t_1}{4}\int d^3r\sum_{ij}\langle\, i\, j\, |\delta(\boldsymbol{r}-\hat{\boldsymbol{r}}_1)\,\delta(\boldsymbol{r}-\hat{\boldsymbol{r}}_2)\left(\hat{\boldsymbol{k}}_1^2-\hat{\boldsymbol{k}}_1\cdot\hat{\boldsymbol{k}}_2\right)|\, i\, j\,\rangle \\
V_{12} &= -\frac{t_1}{8}\int d^3r\sum_{ij}\langle\, i\, j\, |\delta(\boldsymbol{r}-\hat{\boldsymbol{r}}_1)\,\delta(\boldsymbol{r}-\hat{\boldsymbol{r}}_2)\left(\hat{\boldsymbol{k}}_1^2-\hat{\boldsymbol{k}}_1\cdot\hat{\boldsymbol{k}}_2\right)P_\tau|\, i\, j\,\rangle \\
V_{13} &= -\frac{t_1}{8}\int d^3r\sum_{ij}\langle\, i\, j\, |\delta(\boldsymbol{r}-\hat{\boldsymbol{r}}_1)\delta(\boldsymbol{r}-\hat{\boldsymbol{r}}_2)\left(\hat{\boldsymbol{k}}_1^2-\hat{\boldsymbol{k}}_1\cdot\hat{\boldsymbol{k}}_2\right)P_\tau\,\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2|\, i\, j\,\rangle
\end{aligned}$$

(1.9), (1.10) を使うと

$$\begin{aligned}
V_{11} &= \frac{t_1}{4}\int d^3r\sum_{ij}\Big(\langle\, i\,|\delta(\boldsymbol{r}-\hat{\boldsymbol{r}})\hat{\boldsymbol{k}}^2|\, i\,\rangle\langle\, j\,|\delta(\boldsymbol{r}-\hat{\boldsymbol{r}})|\, j\,\rangle-\langle\, i\,|\delta(\boldsymbol{r}-\hat{\boldsymbol{r}})\,\hat{\boldsymbol{k}}\,|\, i\,\rangle\cdot\langle\, j\,|\delta(\boldsymbol{r}-\hat{\boldsymbol{r}})\,\hat{\boldsymbol{k}}\,|\, j\,\rangle\Big) \\
&= \frac{t_1}{4}\int d^3r\left[\left(\tau-\frac{1}{2}\boldsymbol{\nabla}^2\rho\right)\rho+\frac{1}{4}\,(\boldsymbol{\nabla}\rho)\cdot(\boldsymbol{\nabla}\rho)\right]=\frac{t_1}{4}\int d^3r\left(\tau\rho-\frac{3}{4}\rho\boldsymbol{\nabla}^2\rho\right) \\
V_{12} &= -\frac{t_1}{8}\sum_q\int d^3r\left(\tau_q\rho_q-\frac{3}{4}\rho_q\boldsymbol{\nabla}^2\rho_q\right)
\end{aligned}$$

である。V_{13} で

$$\begin{aligned}
V_{13} = &-\frac{t_1}{8}\sum_q\int d^3r\sum_{ij}\langle\, i\,|\delta(\boldsymbol{r}-\hat{\boldsymbol{r}})\hat{\boldsymbol{k}}^2\tau_q\boldsymbol{\sigma}|\, i\,\rangle\cdot\langle\, j\,|\delta(\boldsymbol{r}-\hat{\boldsymbol{r}})\tau_q\boldsymbol{\sigma}|\, j\,\rangle \\
&+\frac{t_1}{8}\sum_q\int d^3r\sum_{ij}\langle\, i\, j\,|\delta(\boldsymbol{r}-\hat{\boldsymbol{r}}_1)\delta(\boldsymbol{r}-\hat{\boldsymbol{r}}_2)\hat{\boldsymbol{k}}_1\cdot\hat{\boldsymbol{k}}_2\,\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2\,\tau_{1q}\tau_{2q}|\, i\, j\,\rangle
\end{aligned}$$

の第 1 項は (1.11) から 0 である。また, ハートリー・フォック基底状態 $|\,\rangle$ が回転不変ならば

$$\sum_i\langle\, i\,|\delta(\boldsymbol{r}-\hat{\boldsymbol{r}})\hat{\boldsymbol{k}}\cdot\boldsymbol{\sigma}\tau_q|\, i\,\rangle=0\,,\qquad \sum_i\langle\, i\,|\delta(\boldsymbol{r}-\hat{\boldsymbol{r}})(\hat{\boldsymbol{k}}\times\boldsymbol{\sigma})^{(2)}\tau_q|\, i\,\rangle=0$$

である。これと

$$\hat{\boldsymbol{k}}_1\cdot\hat{\boldsymbol{k}}_2\,\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2=\frac{1}{3}\hat{\boldsymbol{k}}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_1\,\hat{\boldsymbol{k}}_2\cdot\boldsymbol{\sigma}_2+\frac{1}{2}(\hat{\boldsymbol{k}}_1\times\boldsymbol{\sigma}_1)\cdot(\hat{\boldsymbol{k}}_2\times\boldsymbol{\sigma}_2)+(\hat{\boldsymbol{k}}_1\times\boldsymbol{\sigma}_1)^{(2)}\cdot(\hat{\boldsymbol{k}}_2\times\boldsymbol{\sigma}_2)^{(2)} \tag{1.12}$$

を使うと

$$\begin{aligned}
V_{13} &= \frac{t_1}{16}\sum_q\int d^3r\sum_{ij}\langle\, i\, j\,|\delta(\boldsymbol{r}-\hat{\boldsymbol{r}}_1)\delta(\boldsymbol{r}-\hat{\boldsymbol{r}}_2)(\hat{\boldsymbol{k}}_1\times\boldsymbol{\sigma}_1)\cdot(\hat{\boldsymbol{k}}_2\times\boldsymbol{\sigma}_2)\,\tau_{1q}\tau_{2q}|\, i\, j\,\rangle \\
&= \frac{t_1}{16}\sum_q\int d^3r\sum_i\langle\, i\,|\delta(\boldsymbol{r}-\hat{\boldsymbol{r}})\hat{\boldsymbol{k}}\times\boldsymbol{\sigma}\tau_q|\, i\,\rangle\cdot\sum_j\langle\, j\,|\delta(\boldsymbol{r}-\hat{\boldsymbol{r}})\hat{\boldsymbol{k}}\times\boldsymbol{\sigma}\tau_q|\, j\,\rangle \\
&= \frac{t_1}{16}\sum_q\int d^3r\,\boldsymbol{J}_q^2
\end{aligned}$$

以上から

$$V_1 = \frac{t_1}{16}\int d^3r \left(4\tau\rho - 3\rho\boldsymbol{\nabla}^2\rho - 2\sum_q \tau_q\rho_q + \frac{3}{2}\sum_q \rho_q\boldsymbol{\nabla}^2\rho_q + \sum_q \boldsymbol{J}_q^2\right)$$

t_2 **項**

$$V_2 = \frac{t_2}{8}\sum_{ij}\langle ij\,|\left(\hat{\boldsymbol{k}}_1 - \hat{\boldsymbol{k}}_2\right)\delta(\hat{\boldsymbol{r}}_1 - \hat{\boldsymbol{r}}_2)\cdot\left(\hat{\boldsymbol{k}}_1 - \hat{\boldsymbol{k}}_2\right)(1 - P_r P_\sigma P_\tau)\,|\,ij\,\rangle$$

この場合, 相対運動の波動関数で表すと $\hat{\boldsymbol{k}}_1 - \hat{\boldsymbol{k}}_2$ は相対位置 $\boldsymbol{r}_{12}$ の微分で置き換えられるから, 行列要素は

$$\left|\boldsymbol{\nabla}_{12}R(r_{12})\,Y_{LM}(\theta_{12},\varphi_{12})\right|^2 \quad \text{at } \boldsymbol{r}_{12} = 0$$

に比例する。したがって $L = 1$ 成分のみが寄与するから $P_r = -1$ としてよい。

$$\begin{aligned}
V_2 &= \frac{t_2}{8}\sum_{ij}\langle\, i\,j\,|\left(\hat{\boldsymbol{k}}_1 - \hat{\boldsymbol{k}}_2\right)\delta(\hat{\boldsymbol{r}}_1 - \hat{\boldsymbol{r}}_2)\cdot\left(\hat{\boldsymbol{k}}_1 - \hat{\boldsymbol{k}}_2\right)\left(1 + P_\tau\frac{1 + \boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2}{2}\right)|\,i\,j\,\rangle \\
&= \frac{t_2}{4}\sum_{ij}\langle\, i\,j\,|\hat{\boldsymbol{k}}_1\delta(\hat{\boldsymbol{r}}_1 - \hat{\boldsymbol{r}}_2)\cdot(\hat{\boldsymbol{k}}_1 - \hat{\boldsymbol{k}}_2)\left(1 + P_\tau\frac{1 + \boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2}{2}\right)|\,i\,j\,\rangle \\
&= \frac{t_2}{4}\int d^3r\sum_{ij}\langle\, i\,j\,|\hat{\boldsymbol{k}}_1\delta(\boldsymbol{r} - \hat{\boldsymbol{r}}_1)\delta(\boldsymbol{r} - \hat{\boldsymbol{r}}_2)\cdot(\hat{\boldsymbol{k}}_1 - \hat{\boldsymbol{k}}_2)\left(1 + P_\tau\frac{1 + \boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2}{2}\right)|\,i\,j\,\rangle \\
&= V_{21} + V_{22} + V_{23}
\end{aligned}$$

ただし

$$\begin{aligned}
V_{21} &= \frac{t_2}{4}\int d^3r\sum_{ij}\langle\, i\,j\,|\hat{\boldsymbol{k}}_1\delta(\boldsymbol{r} - \hat{\boldsymbol{r}}_1)\delta(\boldsymbol{r} - \hat{\boldsymbol{r}}_2)\cdot(\hat{\boldsymbol{k}}_1 - \hat{\boldsymbol{k}}_2)|\,i\,j\,\rangle \\
&= \frac{t_2}{4}\int d^3r\sum_{ij}\Big(\langle\, i\,|\hat{\boldsymbol{k}}\,\delta(\boldsymbol{r} - \hat{\boldsymbol{r}})\cdot\hat{\boldsymbol{k}}\,|\,i\,\rangle\langle\, j\,|\delta(\boldsymbol{r} - \hat{\boldsymbol{r}})|\,j\,\rangle \\
&\qquad\qquad - \langle\, i\,|\hat{\boldsymbol{k}}\,\delta(\boldsymbol{r} - \hat{\boldsymbol{r}})|\,i\,\rangle\cdot\langle\, j\,|\delta(\boldsymbol{r} - \hat{\boldsymbol{r}})\hat{\boldsymbol{k}}\,|\,j\,\rangle\Big) \\
&= \frac{t_2}{4}\int d^3r\left(\tau\rho - \frac{1}{4}(\boldsymbol{\nabla}\rho)\cdot(\boldsymbol{\nabla}\rho)\right) = \frac{t_2}{4}\int d^3r\left(\tau\rho + \frac{1}{4}\rho\,\boldsymbol{\nabla}^2\rho\right) \\
V_{22} &= \frac{t_2}{8}\int d^3r\sum_{ij}\langle\, i\,j\,|\hat{\boldsymbol{k}}_1\delta(\boldsymbol{r} - \hat{\boldsymbol{r}}_1)\delta(\boldsymbol{r} - \hat{\boldsymbol{r}}_2)\cdot(\hat{\boldsymbol{k}}_1 - \hat{\boldsymbol{k}}_2)\sum_q \tau_{1q}\tau_{2q}|\,i\,j\,\rangle \\
&= \frac{t_2}{8}\int d^3r\sum_q\left(\tau_q\rho_q + \frac{1}{4}\rho_q\,\boldsymbol{\nabla}^2\rho_q\right) \\
V_{23} &= \frac{t_2}{8}\int d^3r\sum_{ij}\langle\, i\,j\,|\hat{\boldsymbol{k}}_1\delta(\boldsymbol{r} - \hat{\boldsymbol{r}}_1)\delta(\boldsymbol{r} - \hat{\boldsymbol{r}}_2)\cdot(\hat{\boldsymbol{k}}_1 - \hat{\boldsymbol{k}}_2)P_\tau\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2|\,i\,j\,\rangle
\end{aligned}$$

V_{23} を求めるために

$$\begin{aligned}
\hat{\boldsymbol{k}}_1\delta(\boldsymbol{r} - \hat{\boldsymbol{r}}_1)\,\delta(\boldsymbol{r} - \hat{\boldsymbol{r}}_2) &= \big(\hat{\boldsymbol{k}}_1\delta(\boldsymbol{r} - \hat{\boldsymbol{r}}_1)\big)\delta(\boldsymbol{r} - \hat{\boldsymbol{r}}_2) + \delta(\boldsymbol{r} - \hat{\boldsymbol{r}}_1)\hat{\boldsymbol{k}}_1\delta(\boldsymbol{r} - \hat{\boldsymbol{r}}_2) \\
&= i\big(\boldsymbol{\nabla}\delta(\boldsymbol{r} - \hat{\boldsymbol{r}}_1)\big)\,\delta(\boldsymbol{r} - \hat{\boldsymbol{r}}_2) + \delta(\boldsymbol{r} - \hat{\boldsymbol{r}}_1)\,\delta(\boldsymbol{r} - \hat{\boldsymbol{r}}_2)\hat{\boldsymbol{k}}_1 \qquad (1.13)
\end{aligned}$$

と変形する。$\boldsymbol{\nabla}\delta(\boldsymbol{r} - \hat{\boldsymbol{r}}_1)$ の $\boldsymbol{\nabla}$ は $\delta(\boldsymbol{r} - \hat{\boldsymbol{r}}_1)$ だけに作用し $\delta(\boldsymbol{r} - \hat{\boldsymbol{r}}_2)$ には作用しない。また, $\delta(\boldsymbol{r} - \hat{\boldsymbol{r}}_2)$

は $\hat{\boldsymbol{r}}_1$ を含まないから $\hat{\boldsymbol{k}}_1$ とは交換する。(1.13) を使うと

$$\begin{aligned}V_{23} &= \frac{t_2}{8}\sum_q\int d^3r\, i\sum_{ij}\langle\, i\, j\,|\big(\boldsymbol{\nabla}\delta(\boldsymbol{r}-\hat{\boldsymbol{r}}_1)\big)\delta(\boldsymbol{r}-\hat{\boldsymbol{r}}_2)\cdot(\hat{\boldsymbol{k}}_1-\hat{\boldsymbol{k}}_2)\tau_{1q}\tau_{2q}\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2|\, i\, j\,\rangle\\ &+\frac{t_2}{8}\sum_q\int d^3r\,\sum_{ij}\langle\, i\, j\,|\delta(\boldsymbol{r}-\hat{\boldsymbol{r}}_1)\delta(\boldsymbol{r}-\hat{\boldsymbol{r}}_2)\,\hat{\boldsymbol{k}}_1\cdot(\hat{\boldsymbol{k}}_1-\hat{\boldsymbol{k}}_2)\tau_{1q}\tau_{2q}\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2|\, i\, j\,\rangle\end{aligned}$$

(1.11) から粒子 1 または 2 について $\boldsymbol{\sigma}$ だけを含む項は 0 になるから, 残るのは 2 行目の $\hat{\boldsymbol{k}}_1\cdot\hat{\boldsymbol{k}}_2$ を含む項だけである。したがって, V_{13} と同様に (1.12) を使うと

$$V_{13} = -\frac{t_2}{8}\sum_q\int d^3r\,\sum_{ij}\langle\, i\, j\,|\delta(\boldsymbol{r}-\hat{\boldsymbol{r}}_1)\delta(\boldsymbol{r}-\hat{\boldsymbol{r}}_2)\,\hat{\boldsymbol{k}}_1\cdot\hat{\boldsymbol{k}}_2\tau_{1q}\tau_{2q}\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2|\, i\, j\,\rangle = -\frac{t_2}{16}\sum_q\int d^3r\,\boldsymbol{J}_q^2$$

結局

$$V_2 = \frac{t_2}{16}\int d^3r\,\left(4\tau\rho+\rho\boldsymbol{\nabla}^2\rho+2\sum_q\tau_q\rho_q+\frac{1}{2}\sum_q\rho_q\boldsymbol{\nabla}^2\rho_q-\sum_q\boldsymbol{J}_q^2\right)$$

t_3 項

$$V_3 = \frac{t_3}{12}\sum_{ij}\langle\, ij\,|(1+P_\sigma)\delta(\hat{\boldsymbol{r}}_1-\hat{\boldsymbol{r}}_2)\,\rho((\hat{\boldsymbol{r}}_1+\hat{\boldsymbol{r}}_2)/2)|\, ij\,\rangle$$

これは V_0 で $x_0=1$ として全体に ρ を掛ければよいから

$$V_3 = \frac{t_3}{12}\int d^3r\left(\left(1+\frac{1}{2}\right)\rho^2-\left(1+\frac{1}{2}\right)\sum_q\rho_q^2\right)\rho = \frac{t_3}{4}\int d^3r\,\rho_p\rho_n\rho$$

W_0 項

$$V_{LS} = \frac{iW_0}{8}\sum_{ij}\langle\, ij\,|\,(\boldsymbol{\sigma}_1+\boldsymbol{\sigma}_2)\cdot\Big[(\hat{\boldsymbol{k}}_1-\hat{\boldsymbol{k}}_2)\delta(\hat{\boldsymbol{r}}_1-\hat{\boldsymbol{r}}_2)\times(\hat{\boldsymbol{k}}_1-\hat{\boldsymbol{k}}_2)\Big](1-P_rP_\sigma P_\tau)|\, ij\,\rangle$$

この場合も相対運動軌道角運動量 $L=1$ だけが寄与するから $P_r=-1$ である。また, 2 核子系の全スピン $\boldsymbol{\sigma}_1+\boldsymbol{\sigma}_2$ のため $S=0$ は寄与しないから $P_\sigma=1$ である。したがって

$$\begin{aligned}V_{LS} &= \frac{iW_0}{8}\sum_{ij}\langle\, ij\,|\,(\boldsymbol{\sigma}_1+\boldsymbol{\sigma}_2)\cdot\Big[(\hat{\boldsymbol{k}}_1-\hat{\boldsymbol{k}}_2)\delta(\hat{\boldsymbol{r}}_1-\hat{\boldsymbol{r}}_2)\times(\hat{\boldsymbol{k}}_1-\hat{\boldsymbol{k}}_2)\Big](1+P_\tau)|\, ij\,\rangle\\ &= \frac{iW_0}{4}\sum_{ij}\langle\, ij\,|\,(\boldsymbol{\sigma}_1+\boldsymbol{\sigma}_2)\cdot\Big[\hat{\boldsymbol{k}}_1\delta(\hat{\boldsymbol{r}}_1-\hat{\boldsymbol{r}}_2)\times(\hat{\boldsymbol{k}}_1-\hat{\boldsymbol{k}}_2)\Big](1+P_\tau)|\, ij\,\rangle\\ &= \frac{iW_0}{4}\sum_{ij}\int d^3r\,\langle\, ij\,|\,(\boldsymbol{\sigma}_1+\boldsymbol{\sigma}_2)\cdot\Big[\hat{\boldsymbol{k}}_1\delta(\boldsymbol{r}-\hat{\boldsymbol{r}}_1)\delta(\boldsymbol{r}-\hat{\boldsymbol{r}}_2)\times(\hat{\boldsymbol{k}}_1-\hat{\boldsymbol{k}}_2)\Big](1+P_\tau)|\, ij\,\rangle\end{aligned}$$

ここで

$$\begin{aligned}&\hat{\boldsymbol{k}}_1\delta(\boldsymbol{r}-\hat{\boldsymbol{r}}_1)\delta(\boldsymbol{r}-\hat{\boldsymbol{r}}_2)\times(\hat{\boldsymbol{k}}_1-\hat{\boldsymbol{k}}_2)\\ &=\Big(\hat{\boldsymbol{k}}_1\delta(\boldsymbol{r}-\hat{\boldsymbol{r}}_1)\Big)\delta(\boldsymbol{r}-\hat{\boldsymbol{r}}_2)\times(\hat{\boldsymbol{k}}_1-\hat{\boldsymbol{k}}_2)+\delta(\boldsymbol{r}-\hat{\boldsymbol{r}}_1)\delta(\boldsymbol{r}-\hat{\boldsymbol{r}}_2)\,\hat{\boldsymbol{k}}_1\times(\hat{\boldsymbol{k}}_1-\hat{\boldsymbol{k}}_2)\\ &= i\delta(\boldsymbol{r}-\hat{\boldsymbol{r}}_2)\Big(\boldsymbol{\nabla}\delta(\boldsymbol{r}-\hat{\boldsymbol{r}}_1)\Big)\times(\hat{\boldsymbol{k}}_1-\hat{\boldsymbol{k}}_2)-\delta(\boldsymbol{r}-\hat{\boldsymbol{r}}_1)\delta(\boldsymbol{r}-\hat{\boldsymbol{r}}_2)\,\hat{\boldsymbol{k}}_1\times\hat{\boldsymbol{k}}_2\end{aligned}$$

であるから

$$
\begin{aligned}
V_{LS} = & -\frac{W_0}{4}\sum_{ij}\int d^3r\,\langle ij\,|\delta(\boldsymbol{r}-\hat{\boldsymbol{r}}_2)\,(\boldsymbol{\sigma}_1+\boldsymbol{\sigma}_2)\cdot\Big[\Big(\boldsymbol{\nabla}\delta(\boldsymbol{r}-\hat{\boldsymbol{r}}_1)\Big)\times(\hat{\boldsymbol{k}}_1-\hat{\boldsymbol{k}}_2)\Big]\,(1+P_\tau)|\,ij\,\rangle \\
& -\frac{iW_0}{4}\sum_{ij}\int d^3r\,\langle ij\,|\delta(\boldsymbol{r}-\hat{\boldsymbol{r}}_1)\delta(\boldsymbol{r}-\hat{\boldsymbol{r}}_2)\,(\boldsymbol{\sigma}_1+\boldsymbol{\sigma}_2)\cdot\Big[\hat{\boldsymbol{k}}_1\times\hat{\boldsymbol{k}}_2\Big]\,(1+P_\tau)|\,ij\,\rangle
\end{aligned}
$$

第 2 項で添え字 1, 2 を入れ換えると $\hat{\boldsymbol{k}}_2\times\hat{\boldsymbol{k}}_1=-\hat{\boldsymbol{k}}_1\times\hat{\boldsymbol{k}}_2$ より第 2 項は 0 である。(1.11) を考慮すると

$$
\begin{aligned}
V_{LS} &= -\frac{W_0}{4}\int d^3r\,\sum_{ij}\langle\,i\,j\,|\delta(\boldsymbol{r}-\hat{\boldsymbol{r}}_2)\Big(\boldsymbol{\nabla}\delta(\boldsymbol{r}-\hat{\boldsymbol{r}}_1)\Big)\cdot\Big[\hat{\boldsymbol{k}}_1\times\boldsymbol{\sigma}_1-\hat{\boldsymbol{k}}_2\times\boldsymbol{\sigma}_2\Big]\,(1+P_\tau)\,|\,i\,j\,\rangle \\
&= -\frac{W_0}{4}\int d^3r\,\sum_{ij}\Big(\langle\,i\,|\boldsymbol{\nabla}\delta(\boldsymbol{r}-\hat{\boldsymbol{r}})\cdot[\hat{\boldsymbol{k}}\times\boldsymbol{\sigma}]|\,i\,\rangle\langle\,j\,|\delta(\boldsymbol{r}-\hat{\boldsymbol{r}})|\,j\,\rangle \\
&\qquad\qquad -\,\langle\,i\,|\boldsymbol{\nabla}\delta(\boldsymbol{r}-\hat{\boldsymbol{r}})|\,i\,\rangle\cdot\langle\,j\,|\delta(\boldsymbol{r}-\hat{\boldsymbol{r}})\hat{\boldsymbol{k}}\times\boldsymbol{\sigma}|\,j\,\rangle \\
&\qquad\qquad +\sum_q\langle\,i\,|\boldsymbol{\nabla}\delta(\boldsymbol{r}-\hat{\boldsymbol{r}})\cdot[\hat{\boldsymbol{k}}\times\boldsymbol{\sigma}]\tau_q|\,i\,\rangle\langle\,j\,|\delta(\boldsymbol{r}-\hat{\boldsymbol{r}})\tau_q|\,j\,\rangle \\
&\qquad\qquad -\sum_q\langle\,i\,|\boldsymbol{\nabla}\delta(\boldsymbol{r}-\hat{\boldsymbol{r}})\tau_q|\,i\,\rangle\cdot\langle\,j\,|\delta(\boldsymbol{r}-\hat{\boldsymbol{r}})\hat{\boldsymbol{k}}\times\boldsymbol{\sigma}\tau_q|\,j\,\rangle\Big) \\
&= -\frac{W_0}{4}\int d^3r\left(\rho\boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{J}-\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{\nabla}\rho+\sum_q\rho_q\boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{J}_q-\sum_q\boldsymbol{J}_q\cdot\boldsymbol{\nabla}\rho_q\right) \\
&= -\frac{W_0}{2}\int d^3r\left(\rho\boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{J}+\sum_q\rho_q\boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{J}_q\right)
\end{aligned}
$$

Total　以上をまとめると

$$
E=\int d^3r\,H(\boldsymbol{r})
$$

ただし

$$
\begin{aligned}
H(\boldsymbol{r}) = & \frac{t_0}{2}\left(\left(1+\frac{x_0}{2}\right)\rho^2-\left(x_0+\frac{1}{2}\right)\sum_q\rho_q^2\right) \\
& +\frac{t_1}{16}\left(4\tau\rho-3\rho\boldsymbol{\nabla}^2\rho-2\sum_q\tau_q\rho_q+\frac{3}{2}\sum_q\rho_q\boldsymbol{\nabla}^2\rho_q+\sum_q\boldsymbol{J}_q^2\right) \\
& +\frac{t_2}{16}\left(4\tau\rho+\rho\boldsymbol{\nabla}^2\rho+2\sum_q\tau_q\rho_q+\frac{1}{2}\sum_q\rho_q\boldsymbol{\nabla}^2\rho_q-\sum_q\boldsymbol{J}_q^2\right)+\frac{t_3}{4}\rho_p\rho_n\rho \\
& -\frac{W_0}{2}\left(\rho\boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{J}+\sum_q\rho_q\boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{J}_q\right) \\
= & \frac{t_0}{2}\left(\left(1+\frac{x_0}{2}\right)\rho^2-\left(x_0+\frac{1}{2}\right)\sum_q\rho_q^2\right)+\frac{t_1}{4}\tau\rho+\frac{t_2-t_1}{8}\sum_q\tau_q\rho_q \\
& +\frac{t_2-3t_1}{16}\rho\boldsymbol{\nabla}^2\rho+\frac{3t_1+t_2}{32}\sum_q\rho_q\boldsymbol{\nabla}^2\rho_q+\frac{t_1-t_2}{16}\sum_q\boldsymbol{J}_q^2+\frac{t_3}{4}\rho_p\rho_n\rho \\
& -\frac{W_0}{2}\left(\rho\boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{J}+\sum_q\rho_q\boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{J}_q\right)
\end{aligned}
$$

1.5　ハートリー・フォック方程式

波動関数 ϕ_i の変分 $\delta\phi_i$ に関して E が停留値になることを要請する。ϕ_i と ϕ_i^* を独立に扱い, ϕ_i^* の変分のみを考えればよい。このとき

$$\delta\rho = \delta\phi_i^*\,\phi_i\,,\quad \delta\tau = \boldsymbol{\nabla}\delta\phi_i^*\cdot\boldsymbol{\nabla}\phi_i\,,\quad \delta\boldsymbol{J} = -i\delta\phi_i^*\boldsymbol{\sigma}\times\boldsymbol{\nabla}\phi_i$$

であるから, 例えば

$$\int d^3r\,\delta(\rho\tau) = \int d^3r\,\left(\delta\phi_i^*\,\phi_i\,\tau + \rho\boldsymbol{\nabla}\delta\phi_i^*\cdot\boldsymbol{\nabla}\phi_i\right) = \int d^3r\,\delta\phi_i^*\left(\tau - \boldsymbol{\nabla}\cdot\rho\boldsymbol{\nabla}\right)\phi_i$$
$$\int d^3r\,\delta(\rho\boldsymbol{\nabla}^2\rho) = \int d^3r\,\left(\delta\phi_i^*\,\phi_i\,\boldsymbol{\nabla}^2\rho + \rho\boldsymbol{\nabla}^2\delta\phi_i^*\,\phi_i\right) = 2\int d^3r\,\delta\phi_i^*\,\phi_i\,\boldsymbol{\nabla}^2\rho$$

である。他の項も同様にすると

$$\delta E = \int d^3r\,\delta\phi_i^*\left(-\boldsymbol{\nabla}\cdot\frac{\hbar^2}{2m_q^*(\boldsymbol{r})}\boldsymbol{\nabla} + U_q(\boldsymbol{r}) - i\boldsymbol{W}_q(\boldsymbol{r})\cdot(\boldsymbol{\nabla}\times\boldsymbol{\sigma})\right)\phi_i$$

ただし

$$\begin{aligned}
\frac{\hbar^2}{2m_q^*(\boldsymbol{r})} &= \frac{\hbar^2}{2m} + \frac{t_1+t_2}{4}\rho + \frac{t_2-t_1}{8}\rho_q\\
U_q(\boldsymbol{r}) &= t_0\left(\left(1+\frac{x_0}{2}\right)\rho - \left(x_0+\frac{1}{2}\right)\rho_q\right) + \frac{t_3}{4}\left(\rho^2-\rho_q^2\right) + \frac{t_1+t_2}{4}\tau + \frac{t_2-t_1}{8}\tau_q\\
&\quad + \frac{t_2-3t_1}{8}\boldsymbol{\nabla}^2\rho + \frac{3t_1+t_2}{16}\boldsymbol{\nabla}^2\rho_q - \frac{W_0}{2}\left(\boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{J} + \boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{J}_q\right) + \delta_{q\mathrm{p}}V_{\mathrm{C}}\\
\boldsymbol{W}_q(\boldsymbol{r}) &= \frac{t_1-t_2}{8}\boldsymbol{J}_q + \frac{W_0}{2}\left(\boldsymbol{\nabla}\rho + \boldsymbol{\nabla}\rho_q\right)
\end{aligned}$$

ϕ_i は規格化されているからラグランジュの未定乗数法により

$$\delta E - e_i\int d^3r\,\delta\phi_i^*\,\phi_i = 0$$

したがって ϕ_i が満たすべき方程式は

$$\left(-\boldsymbol{\nabla}\cdot\frac{\hbar^2}{2m_q^*(\boldsymbol{r})}\boldsymbol{\nabla} + U_q(\boldsymbol{r}) - i\boldsymbol{W}_q(\boldsymbol{r})\cdot(\boldsymbol{\nabla}\times\boldsymbol{\sigma})\right)\phi_i = e_i\,\phi_i$$

になる。

1.6　スピン・カレント

$$\langle\, j_1\,m_1\;j_2\,m_2\,|\,j_3\,m_3\,\rangle = (-)^{j_1-j_2+m_3}\sqrt{2j_3+1}\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3\\ m_1 & m_2 & -m_3\end{pmatrix} \tag{1.14}$$

Edmonds 95 ページ

$$\begin{aligned}
&\sum_{\mu_1\mu_2\mu_3}(-)^{\ell_1+\ell_2+\ell_3+\mu_1+\mu_2+\mu_3}\begin{pmatrix} j_1 & \ell_2 & \ell_3\\ m_1 & \mu_2 & -\mu_3\end{pmatrix}\begin{pmatrix} \ell_1 & j_2 & \ell_3\\ -\mu_1 & m_2 & \mu_3\end{pmatrix}\begin{pmatrix} \ell_1 & \ell_2 & j_3\\ \mu_1 & -\mu_2 & m_3\end{pmatrix}\\
&= \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3\\ m_1 & m_2 & m_3\end{pmatrix}\begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j_3\\ \ell_1 & \ell_2 & \ell_3\end{Bmatrix}
\end{aligned} \tag{1.15}$$

勾配公式 (Edmonds 84 ページ)

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{\nabla} f(r) Y_{\ell m} = &-\sqrt{\frac{\ell+1}{2\ell+1}}\left(\frac{df}{dr}-\ell\frac{f}{r}\right)\sum_{m'\mu}\langle\,\ell{+}1\,m'\;1\,\mu\,|\,\ell\,m\,\rangle Y_{\ell+1\,m'}\boldsymbol{e}_\mu \\
&+\sqrt{\frac{\ell}{2\ell+1}}\left(\frac{df}{dr}+(\ell+1)\frac{f}{r}\right)\sum_{m'\mu}\langle\,\ell{-}1\,m'\;1\,\mu\,|\,\ell\,m\,\rangle Y_{\ell-1\,m'}\boldsymbol{e}_\mu
\end{aligned}
$$

と $\boldsymbol{e}_\mu\cdot\boldsymbol{e}_{-\nu}=(-)^\mu\delta_{\mu\nu}$ から

$$
\begin{aligned}
r\nabla_\mu Y_{\ell m} &= r\,\boldsymbol{e}_\mu\cdot\boldsymbol{\nabla} f(r) Y_{\ell m} \\
&= \ell\sqrt{\frac{\ell+1}{2\ell+1}}\langle\,\ell{+}1\,m'\;1\;{-\mu}\,|\,\ell\,m\,\rangle(-)^\mu Y_{\ell+1\,m'} \\
&\quad +(\ell+1)\sqrt{\frac{\ell}{2\ell+1}}\langle\,\ell{-}1\,m'\;1\;{-\mu}\,|\,\ell\,m\,\rangle(-)^\mu Y_{\ell-1\,m'} \\
&= -\ell\sqrt{\frac{\ell+1}{2\ell+3}}\langle\,\ell\,m\;1\,\mu\,|\,\ell{+}1\,m'\,\rangle Y_{\ell+1\,m'}-(\ell+1)\sqrt{\frac{\ell}{2\ell-1}}\langle\,\ell\,m\;1\,\mu\,|\,\ell{-}1\,m'\,\rangle Y_{\ell-1\,m'} \\
&= \sum_{LM} f(\ell,L)\langle\,\ell\,m\;1\,\mu\,|\,L\,M\,\rangle Y_{LM} \qquad (1.16)
\end{aligned}
$$

ただし

$$
f(\ell,L)=\begin{cases}
-\ell\sqrt{\dfrac{\ell+1}{2\ell+3}}, & L=\ell+1 \\
-(\ell+1)\sqrt{\dfrac{\ell}{2\ell-1}}, & L=\ell-1 \\
0, & \text{その他}
\end{cases}
$$

$Y_{\ell m}$ の結合 (Edmonds 70 ページ)

$$
\sum_{m_1 m_2}\langle\,\ell_1\,m_1\;\ell_2\,m_2\,|\,L\,M\,\rangle Y_{\ell_1 m_1}Y_{\ell_2 m_2}=\sqrt{\frac{(2\ell_1+1)(2\ell_2+1)}{4\pi(2L+1)}}\langle\,\ell_1\,0\;\ell_2\,0\,|\,L\,0\,\rangle Y_{LM} \qquad (1.17)
$$

$$
\mathcal{Y}_{\ell jm}(\Omega)=\sum_{m_\ell m_s}\langle\,\ell\,m_\ell\;\tfrac{1}{2}\,m_s\,|\,j\,m\,\rangle\,Y_{\ell m_\ell}(\Omega)\,|m_s\rangle
$$

とする。

$$
\nabla_\mu R(r)\mathcal{Y}_{\ell jm}=\frac{r_\mu}{r}\frac{dR}{dr}\mathcal{Y}_{\ell jm}+R(r)\nabla_\mu\mathcal{Y}_{\ell jm}=\sqrt{\frac{4\pi}{3}}\frac{dR}{dr}Y_{1\mu}\mathcal{Y}_{\ell jm}+R(r)\nabla_\mu\mathcal{Y}_{\ell jm}
$$

であるから

$$
\begin{aligned}
J_{\lambda\mu} &= \sum_\alpha R_\alpha(r)\mathcal{Y}^\dagger_{\ell jm}\,(\nabla\sigma)_{(11)\lambda\mu}\,R_\alpha(r)\mathcal{Y}_{\ell jm} \\
&= \sqrt{\frac{4\pi}{3}}\sum_\alpha R_\alpha\frac{dR_\alpha}{dr}\mathcal{Y}^\dagger_{\ell jm}\,(Y_1\sigma)_{(11)\lambda\mu}\,\mathcal{Y}_{\ell jm}+\sum_\alpha R_\alpha^2\mathcal{Y}^\dagger_{\ell jm}\,(\nabla\sigma)_{(11)\lambda\mu}\,\mathcal{Y}_{\ell jm}
\end{aligned}
$$

となる。そこで

$$
R_{\lambda\mu}=\sum_{m=-j}^{j}\mathcal{Y}^\dagger_{\ell jm}\,(Y_1\sigma)_{(11)\lambda\mu}\,\mathcal{Y}_{\ell jm}\,,\qquad S_{\lambda\mu}=\sum_{m=-j}^{j}\mathcal{Y}^\dagger_{\ell jm}\,(\nabla\sigma)_{(11)\lambda\mu}\,\mathcal{Y}_{\ell jm}
$$

を考える。

$R_{\lambda\mu}$ は

$$R_{\lambda\mu} = \sum_m \langle \ell jm|\delta(\Omega - \hat{\Omega})\,(Y_1\sigma)_{(11)\lambda\mu}\,|\ell jm\rangle$$

と書ける。時間反転 T に対して

$$T|\ell jm\rangle = (-)^{j+m}|\ell j\ -m\rangle$$

であるから

$$\begin{aligned} R_{\lambda\mu} &= \sum_m \langle \ell j\ -m|\delta(\Omega - \hat{\Omega})\,(Y_1\sigma)_{(11)\lambda\mu}\,|\ell j\ -m\rangle \\ &= \sum_m \langle \ell jm|\left(T\delta(\Omega - \hat{\Omega})\,(Y_1\sigma)_{(11)\lambda\mu}\,T^{-1}\right)|\ell jm\rangle^* \end{aligned}$$

$(TY_{\ell m}T^{-1})^\dagger = Y_{\ell m}$, $(T\sigma_\mu T^{-1})^\dagger = -\,\sigma_\mu$ であるから

$$R_{\lambda\mu} = -\sum_m \langle \ell jm|\delta(\Omega - \hat{\Omega})\,(Y_1\sigma)_{(11)\lambda\mu}\,|\ell jm\rangle = -\,R_{\lambda\mu} = 0$$

になる。

$R_{\lambda\mu} = 0$ は時間反転を直接使わなくても導ける。$R_{\lambda\mu}$ を展開すると (以下では λ, μ, ℓ, j 以外の index については和をとる)

$$R_{\lambda\mu} = \sum \langle\, \ell\, m_\ell\ \tfrac{1}{2}\, m_s\,|\, j\, m\,\rangle \langle\, \ell\, m'_\ell\ \tfrac{1}{2}\, m'_s\,|\, j\, m\,\rangle \langle\, 1\,\mu_1\ 1\,\mu_2\,|\,\lambda\,\mu\,\rangle Y^*_{\ell m_\ell}\, Y_{1\mu_1}\, Y_{\ell m'_\ell} \langle m_s|\sigma_{\mu_2}|m'_s\rangle$$

σ_μ の行列要素は

$$\langle m_s|\sigma_{\mu_2}|m'_s\rangle = \sqrt{3}\,\langle\, \tfrac{1}{2}\, m'_s\ 1\,\mu_2\,|\,\tfrac{1}{2}\, m_s\,\rangle$$

であるから

$$\begin{aligned} R_{\lambda\mu} = \sqrt{3}\sum &\langle\, \ell\, m_\ell\ \tfrac{1}{2}\, m_s\,|\, j\, m\,\rangle \langle\, \ell\, m'_\ell\ \tfrac{1}{2}\, m'_s\,|\, j\, m\,\rangle \langle\, 1\,\mu_1\ 1\,\mu_2\,|\,\lambda\,\mu\,\rangle \langle\, \tfrac{1}{2}\, m'_s\ 1\,\mu_2\,|\,\tfrac{1}{2}\, m_s\,\rangle \\ &(-)^{m_\ell} Y_{\ell -m_\ell}\, Y_{1\mu_1}\, Y_{\ell m'_\ell} \end{aligned}$$

m を $-m$ に置き換え

$$\langle\, j_1\, m_1\ j_2\, m_2\,|\, j_3\, m_3\,\rangle = (-)^{j_1+j_2-j_3} \langle\, j_1\ -m_1\ j_2\ -m_2\,|\, j_3\ -m_3\,\rangle$$

を使うと

$$\begin{aligned} R_{\lambda\mu} = \sqrt{3}\sum &\langle\, \ell\ -m_\ell\ \tfrac{1}{2}\ -m_s\,|\, j\, m\,\rangle \langle\, \ell\ -m'_\ell\ \tfrac{1}{2}\ -m'_s\,|\, j\, m\,\rangle \langle\, 1\,\mu_1\ 1\,\mu_2\,|\,\lambda\,\mu\,\rangle \langle\, \tfrac{1}{2}\, m'_s\ 1\,\mu_2\,|\,\tfrac{1}{2}\, m_s\,\rangle \\ &(-)^{m_\ell} Y_{\ell -m_\ell}\, Y_{1\mu_1}\, Y_{\ell m'_\ell} \end{aligned}$$

$-m_\ell$, $-m'_\ell$, $-m_s$, $-m'_s$ を改めて m_ℓ, m'_ℓ, m_s, m'_s とすると

$$\begin{aligned} R_{\lambda\mu} = \sqrt{3}\sum &\langle\, \ell\, m_\ell\ \tfrac{1}{2}\, m_s\,|\, j\, m\,\rangle \langle\, \ell\, m'_\ell\ \tfrac{1}{2}\, m'_s\,|\, j\, m\,\rangle \langle\, 1\,\mu_1\ 1\,\mu_2\,|\,\lambda\,\mu\,\rangle \langle\, \tfrac{1}{2}\ -m'_s\ 1\,\mu_2\,|\,\tfrac{1}{2}\ -m_s\,\rangle \\ &(-)^{-m_\ell} Y_{\ell m_\ell}\, Y_{1\mu_1}\, Y_{\ell -m'_\ell} \end{aligned}$$

CG 係数の性質

$$\langle\, j_1\, m_1\; j_2\, m_2\,|\, j_3\, m_3\,\rangle = (-)^{j_2+m_2}\sqrt{\frac{2j_3+1}{2j_1+1}}\langle\, j_3\; -m_3\; j_2\, m_2\,|\, j_1\; -m_1\,\rangle$$

を $\langle\, \frac{1}{2}\; -m'_s\; 1\, \mu_2\,|\, \frac{1}{2}\; -m_s\,\rangle$ に適用すると

$$\begin{aligned} R_{\lambda\mu} = \sqrt{3}\sum&(-)^{-m_\ell+m'_\ell+\mu_2+1}\langle\, \ell\, m_\ell\; \tfrac{1}{2}\, m_s\,|\, j\, m\,\rangle\langle\, \ell\, m'_\ell\; \tfrac{1}{2}\, m'_s\,|\, j\, m\,\rangle\langle\, 1\, \mu_1\; 1\, \mu_2\,|\, \lambda\, \mu\,\rangle \\ &\langle\, \tfrac{1}{2}\, m_s\; 1\, \mu_2\,|\, \tfrac{1}{2}\, m'_s\,\rangle\, Y_{\ell m_\ell}\, Y_{1\mu_1}\, (-)^{m'_\ell} Y_{\ell -m'_\ell} \end{aligned}$$

$\mu_2 = m'_s - m_s$ であるから

$$-m_\ell + m'_\ell + \mu_2 + 1 = m'_\ell + m'_s - (m_\ell + m_s) + 1 = m - m + 1 = 1$$

したがって

$$\begin{aligned} R_{\lambda\mu} &= -\sqrt{3}\sum\langle\, \ell\, m_\ell\; \tfrac{1}{2}\, m_s\,|\, j\, m\,\rangle\langle\, \ell\, m'_\ell\; \tfrac{1}{2}\, m'_s\,|\, j\, m\,\rangle\langle\, 1\, \mu_1\; 1\, \mu_2\,|\, \lambda\, \mu\,\rangle\langle\, \tfrac{1}{2}\, m_s\; 1\, \mu_2\,|\, \tfrac{1}{2}\, m'_s\,\rangle \\ &\qquad Y^*_{\ell m'_\ell}\, Y_{1\mu_1}\, Y_{\ell m_\ell} \\ &= -R_{\lambda\mu} = 0 \end{aligned}$$

次に $S_{\lambda\mu}$ を求める。この場合, 時間反転を使うと

$$S_{\lambda\mu} = -\sum\langle \ell j m|\, (\nabla\sigma)_{(11)\lambda\mu}\, \delta(\Omega - \hat{\Omega})|\ell j m\rangle$$

となるが, ∇ と $\delta(\Omega - \hat{\Omega})$ は交換しないから $S_{\lambda\mu} = -S_{\lambda\mu}$ とはならない。$R_{\lambda\mu}$ と同様にすると

$$\begin{aligned} S_{\lambda\mu} &= \sqrt{3}\sum\langle\, 1\, \mu_1\; 1\, \mu_2\,|\, \lambda\, \mu\,\rangle\langle\, \ell\, m_\ell\; \tfrac{1}{2}\, m_s\,|\, j\, m\,\rangle\langle\, \ell\, m'_\ell\; \tfrac{1}{2}\, m'_s\,|\, j\, m\,\rangle\langle\, \tfrac{1}{2}\, m'_s\; 1\, \mu_2\,|\, \tfrac{1}{2}\, m_s\,\rangle \\ &\qquad Y^*_{\ell m_\ell}\nabla_{\mu_1} Y_{\ell m'_\ell} \\ &= \sqrt{6}\,(2j+1)\sqrt{2\lambda+1}\sum(-)^{\mu+m_s-1/2}\begin{pmatrix} 1 & 1 & \lambda \\ \mu_1 & \mu_2 & -\mu \end{pmatrix} Y^*_{\ell m_\ell}\nabla_{\mu_1} Y_{\ell m'_\ell} \\ &\qquad \begin{pmatrix} \ell & \frac{1}{2} & j \\ m_\ell & m_s & -m \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \ell & \frac{1}{2} & j \\ m'_\ell & m'_s & -m \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 1 & \frac{1}{2} \\ m'_s & \mu_2 & -m_s \end{pmatrix} \\ &= \sqrt{6}\,(2j+1)\sqrt{2\lambda+1}\sum(-)^{j+1/2+\mu+m'_\ell}\begin{pmatrix} 1 & 1 & \lambda \\ \mu_1 & \mu_2 & -\mu \end{pmatrix} Y^*_{\ell m_\ell}\nabla_{\mu_1} Y_{\ell m'_\ell} \\ &\qquad (-1)^{1/2+1/2+j+m'_s+m_s+m}\begin{pmatrix} \ell & \frac{1}{2} & j \\ m_\ell & m_s & -m \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \ell & j \\ -m'_s & -m'_\ell & m \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 1 \\ m'_s & -m_s & \mu_2 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

m_s, m'_s, m について和をとると (1.15) より

$$\begin{aligned} S_{\lambda\mu} = \sqrt{6}\,(2j+1)\sqrt{2\lambda+1}\sum&(-)^{j+1/2+\mu+m'_\ell}\begin{pmatrix} 1 & 1 & \lambda \\ \mu_1 & \mu_2 & -\mu \end{pmatrix} Y^*_{\ell m_\ell}\nabla_{\mu_1} Y_{\ell m'_\ell} \\ &\begin{pmatrix} \ell & \ell & 1 \\ m_\ell & -m'_\ell & \mu_2 \end{pmatrix}\begin{Bmatrix} \ell & \ell & 1 \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & j \end{Bmatrix} \end{aligned}$$

(1.16) を使うと

$$S_{\lambda\mu}=\frac{1}{r}\sqrt{6}\,(2j+1)\sqrt{2\lambda+1}\sum\sqrt{2L+1}(-)^{j+\ell-1/2+\mu+m'_\ell+M}f(\ell,L)\begin{Bmatrix}\ell&\ell&1\\\frac{1}{2}&\frac{1}{2}&j\end{Bmatrix}Y^*_{\ell m_\ell}Y_{LM}$$
$$\begin{pmatrix}1&1&\lambda\\\mu_1&\mu_2&-\mu\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\ell&\ell&1\\m_\ell&-m'_\ell&\mu_2\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\ell&1&L\\m'_\ell&\mu_1&-M\end{pmatrix}$$
$$=\frac{1}{r}\sqrt{6}\,(2j+1)\sqrt{2\lambda+1}\sum\sqrt{2L+1}(-)^{j+1/2+\lambda+M}f(\ell,L)\begin{Bmatrix}\ell&\ell&1\\\frac{1}{2}&\frac{1}{2}&j\end{Bmatrix}Y^*_{\ell m_\ell}Y_{LM}$$
$$(-)^{\ell+1+1+m'_\ell-\mu_1+\mu_2}\begin{pmatrix}\lambda&1&1\\\mu&-\mu_1&-\mu_2\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\ell&\ell&1\\-m'_\ell&m_\ell&\mu_2\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\ell&1&L\\m'_\ell&\mu_1&-M\end{pmatrix}$$

m'_ℓ, μ_1, μ_2 について和をとると

$$S_{\lambda\mu}=\frac{\sqrt{6}}{r}\,(2j+1)\sqrt{2\lambda+1}\sum\sqrt{2L+1}(-)^{j+1/2+\lambda+M}f(\ell,L)\begin{Bmatrix}\ell&\ell&1\\\frac{1}{2}&\frac{1}{2}&j\end{Bmatrix}Y^*_{\ell m_\ell}Y_{LM}$$
$$\begin{pmatrix}\lambda&\ell&L\\\mu&m_\ell&-M\end{pmatrix}\begin{Bmatrix}\lambda&\ell&L\\\ell&1&1\end{Bmatrix}$$
$$=\frac{\sqrt{6}}{r}\,(2j+1)\sum\sqrt{2L+1}(-)^{j+1/2}f(\ell,L)\begin{Bmatrix}\ell&\ell&1\\\frac{1}{2}&\frac{1}{2}&j\end{Bmatrix}\begin{Bmatrix}\lambda&\ell&L\\\ell&1&1\end{Bmatrix}\langle\ell\,-m_\ell\,L\,M\,|\,\lambda\,\mu\rangle Y_{\ell-m_\ell}Y_{LM}$$
$$=\frac{\sqrt{6}}{r}\,(2j+1)\sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}}(-)^{j+1/2+\lambda}\begin{Bmatrix}\ell&\ell&1\\\frac{1}{2}&\frac{1}{2}&j\end{Bmatrix}Y_{\lambda\mu}\sum_{L=\ell\pm1}(2L+1)f(\ell,L)\begin{Bmatrix}\lambda&1&1\\\ell&\ell&L\end{Bmatrix}\begin{pmatrix}\ell&L&\lambda\\0&0&0\end{pmatrix}$$

$\ell+L+\lambda$ が odd のとき

$$\begin{pmatrix}\ell&L&\lambda\\0&0&0\end{pmatrix}=0$$

であり $L=\ell\pm1$ であるから $\lambda=0,\,2$ のとき

$$S_{\lambda\mu}=0$$

になる。

Edmonds 130 ページの表から

$$\begin{Bmatrix}c&c&1\\b&b&a\end{Bmatrix}=(-)^{a+b+c-1}\frac{b(b+1)+c(c+1)-a(a+1)}{\sqrt{4b(b+1)(2b+1)c(c+1)(2c+1)}}$$

であるから

$$\begin{Bmatrix}\ell&\ell&1\\\frac{1}{2}&\frac{1}{2}&j\end{Bmatrix}=(-)^{j-1/2+\ell}\frac{\ell(\ell+1)-j(j+1)+3/4}{\sqrt{6\ell(\ell+1)(2\ell+1)}}$$
$$\begin{Bmatrix}1&\ell&L\\\ell&1&1\end{Bmatrix}=(-)^{\ell+L}\frac{\ell(\ell+1)-L(L+1)+2}{\sqrt{24\ell(\ell+1)(2\ell+1)}}$$

また

$$\begin{pmatrix}\ell&\ell-1&1\\0&0&0\end{pmatrix}=(-)^{\ell}\sqrt{\frac{\ell}{(2\ell-1)(2\ell+1)}},\qquad\begin{pmatrix}\ell&\ell+1&1\\0&0&0\end{pmatrix}=(-)^{\ell-1}\sqrt{\frac{\ell+1}{(2\ell+1)(2\ell+3)}}$$

である。したがって $\lambda = 1$ のとき

$$(2L+1)f(\ell,L)\begin{Bmatrix}\lambda & 1 & 1\\ \ell & \ell & L\end{Bmatrix}\begin{pmatrix}\ell & L & \lambda\\ 0 & 0 & 0\end{pmatrix} = \frac{(-)^\ell}{\sqrt{6}}\frac{\sqrt{\ell(\ell+1)}}{2\ell+1}\begin{cases}\ell & L=\ell+1\\ \ell+1 & L=\ell-1\end{cases}$$

これから

$$\sum_{L=\ell\pm 1}(2L+1)f(\ell,L)\begin{Bmatrix}\lambda & 1 & 1\\ \ell & \ell & L\end{Bmatrix}\begin{pmatrix}\ell & L & \lambda\\ 0 & 0 & 0\end{pmatrix} = \frac{(-)^\ell}{\sqrt{6}}\sqrt{\ell(\ell+1)}$$

したがって

$$S_{1\mu} = \frac{1}{\sqrt{24\pi}}\frac{2j+1}{r}\Big(\ell(\ell+1)-j(j+1)+3/4\Big)Y_{1\mu}$$

$r\,Y_{1\mu} = \sqrt{3/4\pi}\,r_\mu$ であるから

$$S_{1\mu} = \frac{1}{\sqrt{2}}\frac{r_\mu}{4\pi r^2}(2j+1)\Big(\ell(\ell+1)-j(j+1)+3/4\Big)$$

1.7 Recoupling of tensors

ランク λ のテンソルのスカラー積を

$$T_\lambda\cdot S_\lambda = \sum_\mu (-)^\mu T_{\lambda\mu}S_{\lambda\,-\mu} = (-)^\lambda\sqrt{2\lambda+1}\,(T_\lambda S_\lambda)_{00}$$

で定義する (λ は整数)。S と U が交換する場合

$$\begin{aligned}
&(R_{k_1}S_{k_2})_\lambda\cdot(U_{k_3}V_{k_4})_\lambda\\
&=\sum(-)^\mu\langle\, k_1\,m_1\;k_2\,m_2\,|\,\lambda\,\mu\,\rangle\,R_{k_1m_1}S_{k_2m_2}\langle\, k_3\,m_3\;k_4\,m_4\,|\,\lambda\;-\mu\,\rangle\,U_{k_3m_3}V_{k_4m_4}\\
&=\sum(-)^\mu\langle\, k_1\,m_1\;k_2\,m_2\,|\,\lambda\,\mu\,\rangle\,\langle\, k_3\,m_3\;k_4\,m_4\,|\,\lambda\;-\mu\,\rangle\langle\, k_1\,m_1\;k_3\,m_3\,|\,j\,m\,\rangle\,\langle\, k_2\,m_2\;k_4\,m_4\,|\,j'\,m'\,\rangle\\
&\qquad\qquad (R_{k_1}U_{k_3})_{jm}\,(S_{k_2}V_{k_4})_{j'm'}\\
&=(2\lambda+1)\sqrt{2j+1}\sum(-)^{2k_1+k_3-k_4+2\lambda+2(m_1-k_1)}\langle\, k_2\,m_2\;k_4\,m_4\,|\,j'\,m'\,\rangle\,(R_{k_1}U_{k_3})_{jm}\,(S_{k_2}V_{k_4})_{j'm'}\\
&\qquad\qquad (-)^{k_3+k_4+\lambda-m_3+m_1+\mu}\begin{pmatrix}k_2 & k_1 & \lambda\\ m_2 & m_1 & -\mu\end{pmatrix}\begin{pmatrix}k_3 & k_4 & \lambda\\ m_3 & m_4 & \mu\end{pmatrix}\begin{pmatrix}k_3 & k_1 & j\\ -m_3 & -m_1 & m\end{pmatrix}\\
&=(2\lambda+1)\sqrt{2j+1}\sum(-)^{2k_1+k_3-k_4+2\lambda}\langle\, k_2\,m_2\;k_4\,m_4\,|\,j'\,m'\,\rangle\,(R_{k_1}U_{k_3})_{jm}\,(S_{k_2}V_{k_4})_{j'm'}\\
&\qquad\qquad \begin{Bmatrix}k_2 & k_4 & j\\ k_3 & k_1 & \lambda\end{Bmatrix}\begin{pmatrix}k_2 & k_4 & j\\ m_2 & m_4 & m\end{pmatrix}\\
&=(2\lambda+1)\sum(-)^{2k_1+k_2+k_3-2k_4+2\lambda-m}\begin{Bmatrix}k_2 & k_4 & j\\ k_3 & k_1 & \lambda\end{Bmatrix}(R_{k_1}U_{k_3})_{jm}\,(S_{k_2}V_{k_4})_{j'm'}\\
&\qquad\qquad \langle\, k_2\,m_2\;k_4\,m_4\,|\,j'\,m'\,\rangle\langle\, k_2\,m_2\;k_4\,m_4\,|\,j\;-m\,\rangle\\
&=(2\lambda+1)\sum(-)^{2k_1+k_2+k_3-2k_4+2\lambda-m}\begin{Bmatrix}k_1 & k_2 & \lambda\\ k_4 & k_3 & j\end{Bmatrix}(R_{k_1}U_{k_3})_{jm}\,(S_{k_2}V_{k_4})_{j\,-m}\\
&=(2\lambda+1)(-)^{k_1+k_4+2\lambda}\sum_j W(k_1\,k_2\,k_3\,k_4\,;\lambda\,j)\,(R_{k_1}U_{k_3})_j\cdot(S_{k_2}V_{k_4})_j
\end{aligned}$$

$k_1=k_2=k_3=k_4=1,\ \lambda=0$ の場合

$$(A_1B_1)_0 = -\frac{1}{\sqrt{3}}\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B}\,,\quad (A_1B_1)_{1\mu} = \frac{i}{\sqrt{2}}\,(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B})_\mu\,,\quad W(a\,a\,b\,b\,;0\,c) = \frac{(-)^{a+b-c}}{\sqrt{(2a+1)(2b+1)}}$$

であるから

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B}\,\boldsymbol{C}\cdot\boldsymbol{D} &= W(1\,1\,1\,1\,;0\,0)\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{C}\,\boldsymbol{B}\cdot\boldsymbol{D} - \frac{3}{2}W(1\,1\,1\,1\,;0\,1)\,(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{C})\cdot(\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{D}) \\
&\quad + 3W(1\,1\,1\,1\,;0\,2)\,(A_1C_1)_2\cdot(B_1D_1)_2 \\
&= \frac{1}{3}\,\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{C}\,\boldsymbol{B}\cdot\boldsymbol{D} + \frac{1}{2}\,(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{C})\cdot(\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{D}) + (A_1C_1)_2\cdot(B_1D_1)_2
\end{aligned}
$$

2　核子の弾性散乱と偏極

Ivan Úlehla et al., Optical model of the atomic nucleus (1964, Academic)

2.1　クーロン散乱波

シュレディンガー方程式

$$\left(-\frac{1}{2m}\boldsymbol{\nabla}^2 + \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r}\right)\psi(\boldsymbol{r}) = E\psi(\boldsymbol{r})$$

つまり

$$\left(\boldsymbol{\nabla}^2 + k^2 - \frac{2k\eta}{r}\right)\psi(\boldsymbol{r}) = 0\,, \qquad E = \frac{k^2}{2m}\,, \quad \eta = m\frac{Z_1 Z_2 e^2}{k}$$

を考える。

$$\psi(\boldsymbol{r}) = e^{ikz}\, f(u)\,, \quad u = r - z$$

とすると

$$\frac{\partial\psi}{\partial x} = e^{ikz}\,\frac{x}{r}\,f'\,, \quad \frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} = e^{ikz}\left[\left(\frac{1}{r} - \frac{x^2}{r^3}\right)f' + \frac{x^2}{r^2}f''\right]$$

$$\frac{\partial\psi}{\partial z} = e^{ikz}\left[ikf - \frac{u}{r}f'\right]\,, \quad \frac{\partial^2\psi}{\partial z^2} = e^{ikz}\left[-k^2 f - \frac{2iku}{r}f' + \frac{x^2+y^2}{r^2}f' + \frac{u^2}{r^2}f''\right]$$

であるから

$$\boldsymbol{\nabla}^2\psi(\boldsymbol{r}) = e^{ikz}\left(\frac{2u}{r}f'' + \frac{2(1-iku)}{r}f' - k^2 f\right)$$

したがって

$$\left(u\frac{d^2}{du^2} + (1-iku)\frac{d}{du} - k\eta\right)f(u) = 0$$

ここで $\rho = iku = ik(r-z)$ とすると

$$\left(\rho\frac{d^2}{d\rho^2} + (1-\rho)\frac{d}{d\rho} + i\eta\right)f = 0$$

となる。超幾何微分方程式

$$\left(z\frac{d^2}{dz^2} + (b-z)\frac{d}{dz} - a\right)w(z) = 0$$

の原点で正則な解は

$$M(a,b,z) = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{(a)_n\, z^n}{(b)_n\, n!}\,, \qquad (a)_n = a(a+1)\cdots(a+n-1)\,, \quad (a)_0 = 1$$

であるから

$$\psi_c(\boldsymbol{r}) = A\, e^{ikz} M(-i\eta, 1, ik(r-z)) \tag{2.1}$$

が求める解である。

$|z| \to \infty$ での漸近形

$$M(a,b,z) = \frac{\Gamma(b)}{\Gamma(b-a)}\, e^{i\varepsilon\pi a} z^{-a}\, g(a, a-b+1, -z) + \frac{\Gamma(b)}{\Gamma(a)}\, e^z\, z^{a-b}\, g(1-a, b-a, z) \tag{2.2}$$

ただし

$$\varepsilon = 1\ (\ -\pi/2 < \operatorname{Arg} z < 3\pi/2\ ),\quad -1\ (\ -3\pi/2 < \operatorname{Arg} z \le -\pi/2\ )$$

$$g(a,b,z) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(a)_n\,(b)_n}{n!\,z^n} = 1 + \frac{ab}{z} + \frac{a(a+1)b(b+1)}{2z^2} + \cdots$$

を使うと

$$M(-i\eta,1,ik(r-z)) = \frac{e^{\pi\eta/2}}{\Gamma(1+i\eta)} e^{i\eta\log ku}\left(1+\frac{\eta^2}{iku}\right) + \frac{e^{\pi\eta/2}}{\Gamma(-i\eta)}\frac{e^{iku-i\eta\log ku}}{iku}\left(1+\frac{(1+i\eta)^2}{iku}\right)$$

である。

$$A = \Gamma(1+i\eta)\,e^{-\pi\eta/2}$$

とし, $i\Gamma(-i\eta) = -\Gamma(1-i\eta)/\eta$, $u = r - z = 2r\sin^2(\theta/2)$ を使うと, $r\to\infty$ のとき

$$\psi_c(\boldsymbol{r}) \longrightarrow \left(1+\frac{\eta^2}{2ikr\sin^2(\theta/2)}\right) e^{ikz+i\eta\log k(r-z)} + f_c(\theta)\,\frac{e^{ikr-i\eta\log 2kr}}{r} \tag{2.3}$$

ただし

$$\begin{aligned} f_c(\theta) &= -\eta\,\frac{\Gamma(1+i\eta)}{\Gamma(1-i\eta)}\frac{e^{-i\eta\log\sin^2(\theta/2)}}{2k\sin^2(\theta/2)} \\ &= -\frac{\eta}{2k\sin^2(\theta/2)}\exp\Big(-i\eta\log\sin^2(\theta/2) + 2i\sigma_0\Big),\quad \sigma_0 = \operatorname{Arg}\Gamma(1+i\eta) \end{aligned} \tag{2.4}$$

である。

2.2　クーロン波の部分波展開

$$\psi(\boldsymbol{r}) = \frac{u_\ell(r)}{r}\,Y_{\ell m}(\theta,\varphi)$$

とすると

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} + k^2 - \frac{2k\eta}{r} - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2}\right)u_\ell(r) = 0 \tag{2.5}$$

である。

$$u_\ell(r) = e^{ikr}(kr)^{\ell+1}v_\ell(\rho),\quad \rho = -2ikr$$

とおくと

$$\left(\rho\frac{d^2}{d\rho^2} + (2\ell+2-\rho)\,\frac{d}{d\rho} - (\ell+1+i\eta)\right)v_\ell = 0$$

原点で正則な解　原点で正則な解は

$$v_\ell(r) = c_\ell\,M(\ell+1+i\eta, 2(\ell+1), -2ikr)$$

である。$r\to\infty$ では

$$\begin{aligned} &M(\ell+1+i\eta, 2(\ell+1), -2ikr) \\ &\longrightarrow \frac{(2\ell+1)!\,e^{\pi\eta/2}}{2^\ell\,|\Gamma(\ell+1+i\eta)|}\frac{e^{-ikr}}{(kr)^{\ell+1}}\sin\Big(kr - \eta\log(2kr) - \pi\ell/2 + \sigma_\ell\Big) \end{aligned}$$

ただし
$$\sigma_\ell = \mathrm{Arg}\,\Gamma(\ell+1+i\eta) \tag{2.6}$$
となるから
$$c_\ell = \frac{2^\ell\, e^{-\pi\eta/2}\,|\Gamma(\ell+1+i\eta)|}{(2\ell+1)!}$$
とすれば
$$u_\ell(r) = F_\ell(\eta, kr) = e^{ikr}(kr)^{\ell+1} c_\ell\, M(\ell+1+i\eta, 2(\ell+1), -2ikr) \tag{2.7}$$
は $r \to \infty$ のとき
$$F_\ell(\eta, kr) \longrightarrow \sin\Big(kr - \eta\log(2kr) - \pi\ell/2 + \sigma_\ell\Big)$$
となる。$|z| \to 0$ のとき $M(a,b,z) = 1 + bz/a + \cdots$ であるから
$$F_\ell(\eta, kr) \longrightarrow c_\ell\, kr^{\ell+1}\,, \quad (\ r \to 0\ )$$

原点で発散する解

$U(a,b,z)$ が解ならば $e^z U(b-a, b, -z)$ も解である。(2.5) の解として
$$\begin{aligned} G_\ell(\eta, kr) &= 2^\ell\, e^{\pi\eta/2}\,(kr)^{\ell+1} e^{ikr}\Big[e^{i(\sigma_\ell-\pi\ell-\pi/2)} U(\ell+1+i\eta, 2\ell+2, -2ikr) \\ &\qquad +\ e^{-i(\sigma_\ell-\pi\ell-\pi/2)} e^{-2ikr} U(\ell+1-i\eta, 2\ell+2, 2ikr)\Big] \\ &= 2^{\ell+1}\, e^{\pi\eta/2}\,(kr)^{\ell+1}\,\mathrm{Re}\Big[e^{i(kr+\sigma_\ell-\pi\ell-\pi/2)} U(\ell+1+i\eta, 2\ell+2, -2ikr)\Big] \end{aligned}$$
がある。$|z| \to \infty$ のとき
$$U(a,b,z) \longrightarrow z^{-a} g(a, a-b+1, -z)$$
であるから
$$G_\ell(\eta, kr) \longrightarrow \cos\Big(kr - \eta\log(2kr) - \pi\ell/2 + \sigma_\ell\Big)$$
一方, $|z| \to 0$ では
$$U(a,b,z) \to \frac{\Gamma(b-1)}{\Gamma(a)}\, z^{1-b}$$
より
$$G_\ell(\eta, kr) \to \frac{2\ell+1}{c_\ell}\,(kr)^{-\ell}$$
となる。

F_ℓ と G_ℓ の線形結合から
$$u_\ell^{(\pm)}(r) = e^{\mp i\sigma_\ell}\Big(G_\ell(\eta, kr) \pm i\, F_\ell(\eta, kr)\Big)$$
を作ると, $r \to \infty$ のとき
$$u_\ell^{(\pm)}(r) \longrightarrow \exp\Big(\pm i\,(kr - \eta\log(2kr) - \pi\ell/2)\Big)$$
となる。

(2.1) で与えられるクーロン波 ψ_c は
$$\begin{aligned} \psi_c(\boldsymbol{r}) &= \frac{1}{kr}\sum_{\ell=0}^{\infty}(2\ell+1)\, i^\ell\, e^{i\sigma_\ell} F_\ell(\eta, kr)\, P_\ell(cos\theta) \\ &= \frac{1}{2ikr}\sum_{\ell=0}^{\infty}(2\ell+1)\, i^\ell\ \Big(e^{2i\sigma_\ell} u_\ell^{(+)}(r) - u_\ell^{(-)}(r)\Big)\ P_\ell(\cos\theta) \end{aligned}$$

と展開できる。これから

$$
\begin{aligned}
\psi_c(\boldsymbol{r}) &= \frac{1}{2ikr}\sum_{\ell=0}^{\infty}(2\ell+1)\,i^\ell\,\left[u_\ell^{(+)}-u_\ell^{(-)}+\left(e^{2i\sigma_\ell}-1\right)\,u_\ell^{(+)}\right]\,P_\ell(\cos\theta)\\
&\to \frac{1}{2ikr}\sum_{\ell=0}^{\infty}(2\ell+1)\,i^\ell\,\left(u_\ell^{(+)}-u_\ell^{(-)}\right)\,P_\ell(\cos\theta)\\
&\quad+\frac{e^{ikr-i\eta\log(2kr)}}{2ikr}\sum_{\ell=0}^{\infty}(2\ell+1)\,\left(e^{2i\sigma_\ell}-1\right)\,P_\ell(\cos\theta)
\end{aligned}
$$

(2.3), (2.4) と比較すると

$$
\frac{1}{2ikr}\sum_{\ell=0}^{\infty}(2\ell+1)\,i^\ell\,\left(u_\ell^{(+)}-u_\ell^{(-)}\right)P_\ell(\cos\theta)\to\left(1+\frac{\eta^2}{2ikr\sin^2(\theta/2)}\right)e^{ikz+i\eta\log k(r-z)} \tag{2.8}
$$

$$
f_c(\theta)=\frac{1}{2ik}\sum_{\ell=0}^{\infty}(2\ell+1)\left(e^{2i\sigma_\ell}-1\right)P_\ell(\cos\theta) \tag{2.9}
$$

である。

- (2.6) で定義した σ_ℓ は次の性質を持つ。$\Gamma(\ell+1+i\eta)=(\ell+i\eta)\Gamma(\ell+i\eta)$ より

$$
\sigma_\ell=\sigma_{\ell-1}+\tan^{-1}\frac{\eta}{\ell}
$$

また

$$
\frac{1}{\Gamma(z)}=z\,e^{\gamma z}\prod_{n=1}^{\infty}\left[(1+z/n)\,e^{-z/n}\right],\quad \gamma=\text{オイラー定数}=0.57721\,56649\,01532
$$

であるから

$$
\sigma_0=\mathrm{Arg}\,\Gamma(1+i\eta)=\mathrm{Arg}\,i\eta\Gamma(i\eta)=-\gamma\eta+\sum_{n=1}^{\infty}\left(\frac{\eta}{n}-\tan^{-1}\frac{\eta}{n}\right)
$$

- F_ℓ と G_ℓ の線形結合 $H_\ell=aF_\ell+bG_\ell$ は漸化式

$$
(2\ell+1)\left(\eta+\frac{\ell(\ell+1)}{\rho}\right)H_\ell=\ell\sqrt{\eta^2+(\ell+1)^2}\,H_{\ell+1}+(\ell+1)\sqrt{\eta^2+\ell^2}\,H_{\ell-1}
$$

を満たす。また, (2.2) から

$$
\begin{aligned}
F_\ell(\eta,\rho)&=\mathrm{Im}\left[e^{i(\rho-\eta\log(2\rho)+\sigma_\ell-\pi\ell/2)}\,g(\ell+1+i\eta,\,-\ell+i\eta,\,2i\rho\,)\right]\\
G_\ell(\eta,\rho)&=\mathrm{Re}\left[e^{i(\rho-\eta\log(2\rho)+\sigma_\ell-\pi\ell/2)}\,g(\ell+1+i\eta,\,-\ell+i\eta,\,2i\rho\,)\right]
\end{aligned}
$$

$a=\ell+1+i\eta,\,b=-\ell+i\eta$ とすると

$$
g(a,b,2i\rho)=1+\frac{ab}{2i\rho}+\frac{1}{2!}\frac{a(a+1)b(b+1)}{(2i\rho)^2}+\cdots=\sum_{k=0}^{\infty}(f_k+ig_k)
$$

f_k+ig_k は漸化式

$$
\begin{aligned}
f_{k+1}+ig_{k+1}&=\frac{(a+k)(b+k)}{(k+1)2i\rho}\,(f_k+ig_k)\\
&=\frac{k(k+1)-\ell(\ell+1)-\eta^2+i(2k+1)\eta}{2i(k+1)\rho}\,(f_k+ig_k)\\
&=(a_k+ib_k)\,(f_k+ig_k)
\end{aligned}
$$

ただし

$$a_k = \frac{(2k+1)\eta}{2(k+1)\rho}\,, \quad b_k = \frac{\ell(\ell+1) - k(k+1) + \eta^2}{2(k+1)\rho}$$

を満たす。つまり

$$f_{k+1} = a_k f_k - b_k g_k\,, \quad g_{k+1} = a_k g_k + b_k f_k\,, \qquad f_0 = 1\,, \ \ g_0 = 0$$

この漸化式から f_k, g_k を求め, これらの和をとれば

$$G_\ell = f\cos\theta - g\sin\theta\,, \quad F_\ell = g\cos\theta + f\sin\theta\,, \qquad f = \sum_k f_k\,, \quad g = \sum_k g_k$$

により G_ℓ, F_ℓ が求まる。ただし

$$\theta = \rho - \eta\log(2\rho) + \sigma_\ell - \pi\ell/2$$

2.3　短距離ポテンシャルとクーロン・ポテンシャル

スピン 1/2 の粒子の弾性散乱を考える。粒子の運動は

$$\left(-\frac{1}{2m}\boldsymbol{\nabla}^2 + V_0(r) + V_s(r)\,\boldsymbol{\ell}\cdot\boldsymbol{\sigma} + \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r}\right)\psi(\boldsymbol{r}) = E\psi(\boldsymbol{r})\,, \quad E = \frac{k^2}{2m} \tag{2.10}$$

で記述されるとする。(2.10) の解 ψ を

$$\psi(\boldsymbol{r}) = \sum_{\ell jm} A_{\ell jm}\frac{u_{\ell j}(r)}{r}\,\mathcal{Y}_{\ell jm}(\theta,\varphi)$$

とすると

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} + k^2 - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} - U_{\ell j}(r) - \frac{2k\eta}{r}\right)u_{\ell j}(r) = 0$$

ただし

$$\eta = \frac{mZ_1Z_2e^2}{k}\,, \qquad U_{\ell j} = 2m\Big(V_0(r) + \varDelta_{\ell j}V_s(r)\Big)\,, \quad \varDelta_{\ell j} = \begin{cases} \ell\,, & j = \ell + 1/2 \\ -(\ell+1)\,, & j = \ell - 1/2 \end{cases}$$

$r \to \infty$ では, $u_{\ell j}$ はクーロンポテンシャルと同じ内向き波と定数倍異なる外向きの波からなるはずであるから

$$u_{\ell j} \longrightarrow u_\ell^{(-)}(r) - e^{2i\sigma_\ell}e^{2i\delta_{\ell j}}u_\ell^{(+)}(r) = e^{i\sigma_\ell}\left[F_\ell + \frac{1}{2i}\left(e^{2i\delta_{\ell j}} - 1\right)(G_\ell + iF_\ell)\right] \tag{2.11}$$

である。したがって

$$\begin{aligned}\psi &\longrightarrow \frac{1}{r}\sum_{\ell jm}A_{\ell jm}\left(u_\ell^{(-)} - e^{2i\sigma_\ell}e^{2i\delta_{\ell j}}u_\ell^{(+)}\right)\mathcal{Y}_{\ell jm} \\ &= \frac{1}{r}\sum_{\ell jm}A_{\ell jm}\left(u_\ell^{(-)} - u_\ell^{(+)}\right)\mathcal{Y}_{\ell jm} + \frac{1}{r}\sum_{\ell jm}A_{\ell jm}\left(1 - e^{2i\sigma_\ell}e^{2i\delta_{\ell j}}\right)u_\ell^{(+)}\,\mathcal{Y}_{\ell jm} \\ &= \frac{1}{r}\sum_{\ell jm}A_{\ell jm}\left(u_\ell^{(-)} - u_\ell^{(+)}\right)\mathcal{Y}_{\ell jm} \\ &\quad + \frac{e^{ikr - i\eta\log(2kr)}}{r}\sum_{\ell jm} i^{-\ell}A_{\ell jm}\left(1 - e^{2i\sigma_\ell}e^{2i\delta_{\ell j}}\right)\mathcal{Y}_{\ell jm}\end{aligned} \tag{2.12}$$

一方, 散乱状態の波動関数は $r \to \infty$ では純粋なクーロン・ポテンシャル中での入射波と散乱波になるはずであるから

$$\psi \longrightarrow \left[\left(1+\frac{\eta^2}{2ikr\sin^2(\theta/2)}\right)e^{ikz+i\eta\log k(r-z)}+f(\theta)\,\frac{e^{ikr-i\eta\log 2kr}}{r}\right]|\chi\rangle$$

と表せる。$|\chi\rangle$ は入射粒子のスピン状態, $f(\theta)$ は 2×2 の行列である。(2.8) より, この漸近形は

$$\psi=\frac{1}{2ikr}\sum_{\ell=0}^{\infty}(2\ell+1)\,i^\ell\,\left(u_\ell^{(+)}-u_\ell^{(-)}\right)P_\ell(\cos\theta)\,|\chi\rangle+\frac{e^{ikr-i\eta\log 2kr}}{r}f(\theta)\,|\chi\rangle$$

と書ける。$P_\ell(\cos\theta)\,|\chi\rangle$ と $f(\theta)\,|\chi\rangle$ は $\mathcal{Y}_{\ell jm}$ を用いて

$$P_\ell(\cos\theta)\,|\chi\rangle=\sum_{jm}a_{\ell jm}\,\mathcal{Y}_{\ell jm}\,,\quad f(\theta)\,|\chi\rangle=\frac{1}{2ik}\sum_{\ell jm}f_{\ell jm}\,\mathcal{Y}_{\ell jm}$$

と展開できるから

$$\psi=\frac{1}{2ikr}\sum_{\ell jm}(2\ell+1)\,i^\ell\,\left(u_\ell^{(+)}-u_\ell^{(-)}\right)a_{\ell jm}\,\mathcal{Y}_{\ell jm}+\frac{e^{ikr-i\eta\log 2kr}}{2ikr}\sum_{\ell jm}f_{\ell jm}\,\mathcal{Y}_{\ell jm} \qquad (2.13)$$

(2.12), (2.13) を比較すると

$$\begin{aligned}A_{\ell jm}&=\frac{2\ell+1}{2k}i^{\ell+1}a_{\ell jm}\\ f_{\ell jm}&=2ki^{-(\ell+1)}A_{\ell jm}\left(e^{2i\sigma_\ell}e^{2i\delta_{\ell j}}-1\right)=(2\ell+1)\left(e^{2i\sigma_\ell}e^{2i\delta_{\ell j}}-1\right)a_{\ell jm}\end{aligned}$$

を得る。これを $f(\theta)$ の展開式に代入すると

$$f(\theta)\,|\chi\rangle=\frac{1}{2ik}\sum_{\ell jm}(2\ell+1)\left[\left(e^{2i\sigma_\ell}-1\right)+e^{2i\sigma_\ell}\left(e^{2i\delta_{\ell j}}-1\right)\right]a_{\ell jm}\,\mathcal{Y}_{\ell jm}$$

第 1 項目の jm についての和は $P_\ell(\cos\theta)\,|\chi\rangle$ になるから

$$\begin{aligned}f(\theta)\,|\chi\rangle&=\frac{1}{2ik}\sum_{\ell}(2\ell+1)\left(e^{2i\sigma_\ell}-1\right)P_\ell(\cos\theta)\,|\chi\rangle+\frac{1}{k}\sum_{\ell jm}(2\ell+1)e^{2i\sigma_\ell}\,T_{\ell j}\,a_{\ell jm}\,\mathcal{Y}_{\ell jm}\\ &=f_c(\theta)\,|\chi\rangle+\frac{1}{k}\sum_{\ell jm}(2\ell+1)e^{2i\sigma_\ell}\,T_{\ell j}\,a_{\ell jm}\,\mathcal{Y}_{\ell jm}\end{aligned}$$

となる。ただし f_c はクーロン散乱の散乱振幅, $T_{\ell j}$ は

$$T_{\ell j}=\frac{1}{2i}\left(e^{2i\delta_{\ell j}}-1\right)=e^{i\delta_{\ell j}}\sin\delta_{\ell j}$$

である。射影演算子

$$Q_+=\frac{\ell+1+\boldsymbol{\ell}\cdot\boldsymbol{\sigma}}{2\ell+1}\,,\quad Q_-=\frac{\ell-\boldsymbol{\ell}\cdot\boldsymbol{\sigma}}{2\ell+1}\,,\quad Q_++Q_-=1$$

を考えると

$$Q_+\mathcal{Y}_{\ell jm}=\begin{cases}\mathcal{Y}_{\ell jm}\,, & j=\ell+1/2\\ 0\,, & j=\ell-1/2\end{cases}\qquad Q_-\mathcal{Y}_{\ell jm}=\begin{cases}0\,, & j=\ell+1/2\\ \mathcal{Y}_{\ell jm}\,, & j=\ell-1/2\end{cases}$$

であるから

$$Q_\pm\,P_\ell(\cos\theta)\,|\chi\rangle=\sum_m a_{\ell\,j=\ell\pm1/2\,m}\,\mathcal{Y}_{\ell\,j=\ell\pm1/2\,m}$$

したがって, $T_{\ell\pm} = T_{\ell\, j=\ell\pm 1/2}$ とおくと

$$
\begin{aligned}
f(\theta) &= f_c(\theta) + \frac{1}{k}\sum_\ell (2\ell+1)e^{2i\sigma_\ell}\Big(T_{\ell+}Q_+ + T_{\ell-}Q_-\Big)P_\ell(\cos\theta) \\
&= f_c(\theta) + \frac{1}{k}\sum_\ell e^{2i\sigma_\ell}\Big[\,(\ell+1)T_{\ell+} + \ell\, T_{\ell-} + (T_{\ell+} - T_{\ell-})\,\boldsymbol{\ell}\cdot\boldsymbol{\sigma}\,\Big]\,P_\ell(\cos\theta)
\end{aligned}
$$

ところで

$$
\boldsymbol{\ell} = -i\,\boldsymbol{n}_\theta \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi} + i\,\boldsymbol{n}\frac{\partial}{\partial\theta}
$$

ただし

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{n} &= (-\sin\varphi,\, \cos\varphi,\, 0\,) = \frac{\boldsymbol{k}_i\times\boldsymbol{k}_f}{|\boldsymbol{k}_i\times\boldsymbol{k}_f|} \\
\boldsymbol{n}_\theta &= (\,-\cos\theta\cos\varphi,\, -\cos\theta\sin\varphi,\, \sin\theta\,)
\end{aligned}
$$

であるから

$$
\boldsymbol{\ell}\cdot\boldsymbol{\sigma}P_\ell(\cos\theta) = -\,i\,\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}\frac{dP_\ell(\cos\theta)}{d\theta} = -\,i\,\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}P_\ell^1(\cos\theta)\,, \quad P_\ell^1(x) = -\sqrt{1-x^2}\,\frac{dP_\ell}{dx}
$$

となる。これから

$$
f(\theta) = A(\theta) + B(\theta)\,\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma} \tag{2.14}
$$

ここで

$$
A(\theta) = f_c(\theta) + \frac{1}{k}\sum_\ell e^{2i\sigma_\ell}\Big((\ell+1)T_{\ell+} + \ell\,T_{\ell-}\Big)P_\ell(\cos\theta) \tag{2.15}
$$

$$
B(\theta) = -\,\frac{i}{k}\sum_\ell e^{2i\sigma_\ell}\Big(T_{\ell+} - T_{\ell-}\Big)P_\ell^1(\cos\theta) \tag{2.16}
$$

数値的に解く場合, 十分遠方の 2 点 $r = r_1$, $r = r_2$ における数値解を

$$
u_{\ell j}(1) = u_{\ell j}(r_1)\,, \quad u_{\ell j}(2) = u_{\ell j}(r_2)
$$

とすると (2.11) から

$$
\frac{u_{\ell j}(1)}{u_{\ell j}(2)} = \frac{F_\ell(1) + T_{\ell j}\Big(G_\ell(1) + iF_\ell(1)\Big)}{F_\ell(2) + T_{\ell j}\Big(G_\ell(2) + iF_\ell(2)\Big)}
$$

であるから

$$
T_{\ell j} = -\,\frac{u_{\ell j}(1)\,F_\ell(2) - u_{\ell j}(2)\,F_\ell(1)}{u_{\ell j}(1)\,G_\ell(2) - u_{\ell j}(2)\,G_\ell(1) + i\Big(u_{\ell j}(1)\,F_\ell(2) - u_{\ell j}(2)\,F_\ell(1)\Big)}
$$

2.4 偏極

系がある特定の量子状態にあるのではなく, 状態 $|\alpha\rangle$ になる確率が w_α の場合を考える。この場合, 多数回の測定における F の期待値は

$$
\langle F\rangle = \sum_\alpha w_\alpha \langle\alpha|F|\alpha\rangle
$$

である。完全系 $\{\,|b\rangle\,\}$ を考えると

$$\langle F\rangle = \sum_\alpha w_\alpha \sum_{b\,b'} \langle\alpha|b\rangle\langle b|F|b'\rangle\langle b'|\alpha\rangle = \sum_{b\,b'}\left(\sum_\alpha w_\alpha \langle b'|\alpha\rangle\langle\alpha|b\rangle\right)\langle b|F|b'\rangle$$

と表せる。そこで密度演算子 ρ を

$$\rho = \sum_\alpha w_\alpha\,|\alpha\rangle\langle\alpha|$$

で定義すると

$$\langle F\rangle = \sum_{b\,b'}\langle b'|\rho|b\rangle\,\langle b|F|b'\rangle = \mathrm{Tr}(\rho F)$$

また

$$\mathrm{Tr}(\rho) = \sum_b \langle b|\rho|b\rangle = \sum_b\sum_\alpha w_\alpha\langle b|\alpha\rangle\langle\alpha|b\rangle = \sum_\alpha w_\alpha\langle\alpha|\alpha\rangle = \sum_\alpha w_\alpha = 1$$

スピン状態ついてアンサンブル平均を行う。スピン 1/2 の場合 ρ は 2×2 行列になるから

$$\rho = a + \boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{\sigma}$$

と表せる。$\sigma_i\sigma_j = \delta_{ij} + i\varepsilon_{ijk}\,\sigma_k$, $\mathrm{Tr}(\boldsymbol{\sigma}) = 0$ であるから

$$\mathrm{Tr}(\rho) = 2a = 1\,, \quad \mathrm{Tr}(\rho\sigma_i) = 2b_i$$

したがって

$$\rho = \frac{1+\boldsymbol{P}\cdot\boldsymbol{\sigma}}{2}\,, \quad \boldsymbol{P} = \mathrm{Tr}(\rho\,\boldsymbol{\sigma})$$

となる。$\boldsymbol{P}$ はスピン $\boldsymbol{\sigma}$ のザンサンブル平均を表す偏極ベクトルである。

入射粒子が常にある 1 つのスピン状態 $|\chi\rangle$ にある純粋アンサンブルの場合, 微分断面積は

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \langle\chi|f^\dagger f|\chi\rangle$$

であるから, 混合アンサンブルについては

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \sum_i w_i\langle\chi_i|f^\dagger f|\chi_i\rangle = \mathrm{Tr}(\rho_{\mathrm{in}} f^\dagger f)$$

となる。ただし

$$\rho_{\mathrm{in}} = \sum_i w_i\,|\chi_i\rangle\langle\chi_i| = \frac{1+\boldsymbol{P}_{\mathrm{in}}\cdot\boldsymbol{\sigma}}{2}$$

は入射状態の密度行列であり, $\boldsymbol{P}_{\mathrm{in}}$ は入射粒子の偏極ベクトルを表す。

$$\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{\sigma}\boldsymbol{B}\cdot\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B} + i\boldsymbol{\sigma}\cdot(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B})$$

を使うと

$$\begin{aligned}\frac{d\sigma}{d\Omega} &= \frac{1}{2}\mathrm{Tr}\Big((1+\boldsymbol{P}_{\mathrm{in}}\cdot\boldsymbol{\sigma})\,(A^* + B^*\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma})\,(A + B\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma})\Big)\\ &= |A|^2 + |B|^2 + 2\mathrm{Re}(AB^*)\,\boldsymbol{P}_{\mathrm{in}}\cdot\boldsymbol{n}\end{aligned} \tag{2.17}$$

散乱後のスピン状態は純粋状態 $|\chi\rangle$ に対して $f(\theta)|\chi\rangle$ になるから, 混合状態の場合には, 散乱後の密度行列 ρ_{f} は

$$\rho_{\mathrm{f}} = \sum_i w_i\,f(\theta)|\chi_i\rangle\langle\chi_i|f(\theta)^\dagger = f\rho_{\mathrm{in}}f^\dagger$$

規格化された密度行列は

$$\rho_{\rm f} = \frac{f\rho_{\rm in} f^\dagger}{{\rm Tr}(\rho_{\rm in} f^\dagger f)}$$

となる。散乱後の偏極ベクトル $\boldsymbol{P}_{\rm f}$ は

$$\boldsymbol{P}_{\rm f} = {\rm Tr}(\rho_{\rm f}\boldsymbol{\sigma}) = \frac{{\rm Tr}(f\rho_{\rm in} f^\dagger \boldsymbol{\sigma})}{{\rm Tr}(\rho_{\rm in} f^\dagger f)}$$

である。k 方向のスピンを $\sigma_k = \boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{\sigma}$ とすれば, $\sigma_n^2 = 1$ であるから

$$\begin{aligned}
{\rm Tr}(f\rho_{\rm in} f^\dagger \sigma_k) &= \frac{1}{2}{\rm Tr}\left((A + B\sigma_n)(1 + \boldsymbol{P}_{\rm in}\cdot\boldsymbol{\sigma})(A^* + B^*\sigma_n)\sigma_k\right) \\
&= \frac{1}{2}{\rm Tr}\Big(2{\rm Re}(A^*B)\,\sigma_n\,\sigma_k + |A|^2\boldsymbol{P}_{\rm in}\cdot\boldsymbol{\sigma}\,\sigma_k + A^*B\,\sigma_n\boldsymbol{P}_{\rm in}\cdot\boldsymbol{\sigma}\,\sigma_k \\
&\qquad + AB^*\,\boldsymbol{P}_{\rm in}\cdot\boldsymbol{\sigma}\,\sigma_n\,\sigma_k + |B|^2\,\sigma_n\,\boldsymbol{P}_{\rm in}\cdot\boldsymbol{\sigma}\,\sigma_n\,\sigma_k\Big)
\end{aligned}$$

ここで

$$\begin{aligned}
{\rm Tr}(\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{\sigma}\,\boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{\sigma}\,\boldsymbol{c}\cdot\boldsymbol{\sigma}) &= {\rm Tr}\left(\Big(\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b} + i\boldsymbol{\sigma}\cdot(\boldsymbol{a}\times\boldsymbol{b})\Big)\,\boldsymbol{c}\cdot\boldsymbol{\sigma}\right) = 2i(\boldsymbol{a}\times\boldsymbol{b})\cdot\boldsymbol{c} \\
{\rm Tr}(\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{\sigma}\,\boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{\sigma}\,\boldsymbol{c}\cdot\boldsymbol{\sigma}\,\boldsymbol{d}\cdot\boldsymbol{\sigma}) &= {\rm Tr}\left(\Big(\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b} + i\boldsymbol{\sigma}\cdot(\boldsymbol{a}\times\boldsymbol{b})\Big)\Big(\boldsymbol{c}\cdot\boldsymbol{d} + i\boldsymbol{\sigma}\cdot(\boldsymbol{c}\times\boldsymbol{d})\Big)\right) \\
&= 2\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b}\,\boldsymbol{c}\cdot\boldsymbol{d} - 2(\boldsymbol{a}\times\boldsymbol{b})\cdot(\boldsymbol{c}\times\boldsymbol{d}) \\
&= 2\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b}\,\boldsymbol{c}\cdot\boldsymbol{d} - 2\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{c}\,\boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{d} + 2\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{d}\,\boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{c}
\end{aligned}$$

を使うと

$$\begin{aligned}
{\rm Tr}(f\rho_{\rm in} f^\dagger \boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{k}) &= 2{\rm Re}(A^*B)\,\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{k} + (|A|^2 - |B|^2)\boldsymbol{P}_{\rm in}\cdot\boldsymbol{k} + 2{\rm Im}(AB^*)(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{P}_{\rm in})\cdot\boldsymbol{k} \\
&\quad + 2|B|^2\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{P}_{\rm in}\,\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{k}
\end{aligned}$$

つまり

$$ {\rm Tr}(f\rho_{\rm in} f^\dagger\,\boldsymbol{\sigma}) = 2\left({\rm Re}(A^*B) + |B|^2(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{P}_{\rm in})\right)\,\boldsymbol{n} + (|A|^2 - |B|^2)\boldsymbol{P}_{\rm in} + 2{\rm Im}(AB^*)\,\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{P}_{\rm in} \tag{2.18}$$

入射粒子の偏極ベクトル $\boldsymbol{P}_{\rm in}$ が入射方向を向いている場合

$$\boldsymbol{P}_{\rm in}\cdot\boldsymbol{n} = 0$$

であるから

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |A|^2 + |B|^2 \tag{2.19}$$

$$\boldsymbol{P}_{\rm f} = \frac{2{\rm Re}(A^*B)\,\boldsymbol{n} + (|A|^2 - |B|^2)\boldsymbol{P}_{\rm in} + 2{\rm Im}(AB^*)\,\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{P}_{\rm in}}{|A|^2 + |B|^2} \tag{2.20}$$

ここで

$$\frac{2AB^*}{|A|^2 + |B|^2} = P(\theta) + i\,Q(\theta)$$

とおくと

$$\boldsymbol{P}_{\rm f} = P(\theta)\,\boldsymbol{n} + Q(\theta)\,\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{P}_{\rm in} + \frac{|A|^2 - |B|^2}{|A|^2 + |B|^2}\boldsymbol{P}_{\rm in}$$

P を polarization, Q を spin rotation という。

2.5　重心系

入射粒子の質量を m, ターゲット原子核の質量を M とする。入射粒子の運動量を $\boldsymbol{p}_0$ とし

$$E_{\rm in} = \sqrt{m^2 + \boldsymbol{p}_0^2}$$

とおく。実験室系での入射粒子, ターゲット原子核の 4 元運動量 p^μ, P^μ は

$$p^\mu = (\,E_{\rm in}\,,\,\boldsymbol{p}_0\,)\,,\quad P^\mu = (\,M\,,\,0\,)$$

重心系での入射粒子, ターゲット原子核の運動量 $p^\mu_{\rm cm}$, $P^\mu_{\rm cm}$ は

$$p^\mu_{\rm cm} = \left(\,\sqrt{m^2+\boldsymbol{p}^2}\,,\,\boldsymbol{p}\,\right)\,,\quad P^\mu_{\rm cm} = \left(\,\sqrt{M^2+\boldsymbol{p}^2}\,,\,-\boldsymbol{p}\,\right)$$

$p^2 = p^2_{\rm cm} = m^2$, $P^2 = P^2_{\rm cm} = M^2$ でありローレンツ変換に対して不変である。同様に $(p+P)^2 = (p_{\rm cm}+P_{\rm cm})^2$ より $p{\cdot}P = p_{\rm cm}{\cdot}P_{\rm cm}$ となるから

$$E_{\rm in}M = \sqrt{(m^2+\boldsymbol{p}^2)(M^2+\boldsymbol{p}^2)} + \boldsymbol{p}^2$$

したがって

$$\boldsymbol{p}^2 = \frac{M^2\left(E^2_{\rm in} - m^2\right)}{m^2 + M^2 + 2ME_{\rm in}} = \frac{\boldsymbol{p}_0^2}{1 + m^2/M^2 + 2E_{\rm in}/M}$$

$|\boldsymbol{p}_0| \ll m$ の場合には, 分母の $E_{\rm in}$ を m で近似すると

$$|\boldsymbol{p}| \approx \frac{1}{1+m/M}|\boldsymbol{p}_0|$$

となり, 非相対論の結果を再現する。

2.6　Dirac 方程式

Dirac 方程式

$$\Big(-i\boldsymbol{\alpha}{\cdot}\boldsymbol{\nabla} + \beta\,(m + U_{\rm s}(r)) + U_0(r)\Big)\,\psi(\boldsymbol{r}) = E\psi(\boldsymbol{r})$$

を考える。4 成分スピノール ψ を上 2 成分と下 2 成分に分け，下成分を消去すると，上成分 F に対する方程式として

$$\Big(-\boldsymbol{\sigma}{\cdot}\boldsymbol{\nabla}D^{-1}\boldsymbol{\sigma}{\cdot}\boldsymbol{\nabla} + m + U_{\rm s} + U_0 - E\Big)\,F(\boldsymbol{r}) = 0$$

ただし

$$D(r) = m + E + U_{\rm s}(r) - U_0(r)$$

を得る。ここで，$\boldsymbol{\sigma}$ は 2×2 のパウリ行列である。

$$F(\boldsymbol{r}) = \sqrt{\frac{D}{m+E}}\,\tilde{F}(\boldsymbol{r}) = \sqrt{1 + \frac{U_{\rm s}(r) - U_0(r)}{m+E}}\,\tilde{F}(\boldsymbol{r})$$

と変換すると

$$\left(-\frac{1}{2m}\boldsymbol{\nabla}^2 + V_0(r) + V_{\rm so}(r)\,\boldsymbol{\sigma}{\cdot}\boldsymbol{\ell}\right)\tilde{F} = \frac{E^2 - m^2}{2m}\,\tilde{F} \tag{2.21}$$

ただし

$$V_0(r) = U_{\rm s} + \frac{E}{m}U_0 + \frac{U_{\rm s}^2 - U_0^2}{2m} + V_{\rm D}\,,\quad V_{\rm so}(r) = -\frac{1}{2mr}\frac{1}{D}\frac{dD}{dr}$$

$$V_{\mathrm{D}}(r) = \frac{1}{2m}\left[\frac{3}{4}\frac{1}{D^2}\left(\frac{dD}{dr}\right)^2 - \frac{1}{rD}\frac{dD}{dr} - \frac{1}{2D}\frac{d^2D}{dr^2}\right]$$

はダーウィン項と呼ばれる。

クーロン力を取り入れる場合は, $U_0(r)$ を $U_0(r) + V_{\mathrm{coul}}(r)$ で置き換える。$r \to \infty$ では

$$V_{\mathrm{coul}}(r) \to \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r}$$

であるから

$$\eta = E\,\frac{Z_1 Z_2 e^2}{k}\,, \qquad k^2 = E^2 - m^2$$

とおくと

$$V_0 \to \frac{E}{m}\frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} = \frac{1}{2m}\frac{2k\eta}{r}\,,$$

となるから, (2.21) は $r \to \infty$ のとき

$$\left(\boldsymbol{\nabla}^2 + k^2 - \frac{2k\eta}{r}\right)\tilde{F} = 0$$

シュレディンガー方程式の η の定義式に含まれる m を E で置き換えればよい。

3　電子散乱と原子核の電荷分布

- D. R. Yennie *et al.*, Phys. Rev. **95** (1954) 500
- T. A. Griffy *et al.*, Phys. Rev. **128** (1962) 833
- H. Feshbach, Theoretical Nuclear Physics – Nuclear Reactions – , 684
- ランダウ, リフシッツ, 相対論的量子力学 I, 152
- モット, マッセイ, 衝突の理論 上 II, 297

4 成分スピノールを

$$\psi(\boldsymbol{r}) = \begin{pmatrix} \dfrac{g(r)}{r}\,\chi_\kappa \\ i\,\dfrac{f(r)}{r}\,\chi_{-\kappa} \end{pmatrix}, \qquad \kappa = \pm\,(j+1/2) = \begin{cases} \ell\,, & j = \ell - 1/2 \\ -(\ell+1)\,, & j = \ell + 1/2 \end{cases}$$

とすると

$$\frac{dg}{dr} = -\,\frac{\kappa}{r}\,g + \Big(E + m - V(r)\Big)\,f\,, \quad \frac{df}{dr} = \frac{\kappa}{r}\,f - \Big(E - m - V(r)\Big)\,g \tag{3.1}$$

である。

3.1　クーロン散乱

$r \to \infty$ のとき

$$\frac{dg}{dr} = (E+m)\,f\,, \qquad \frac{df}{dr} = -\,(E-m)\,g$$

であるから

$$\frac{d^2 g}{dr^2} = -\,k^2\,g\,, \quad \frac{d^2 f}{dr^2} = -\,k^2\,f\,, \qquad k = \sqrt{E^2 - m^2}$$

したがって, g, f ともに $e^{\pm ikr}$ になる。一方,

$$V(r) = -\,\frac{Z\alpha}{r}$$

の場合, $r \to 0$ では

$$\frac{dg}{dr} = -\,\frac{\kappa}{r}\,g + \frac{Z\alpha}{r}\,f\,, \qquad \frac{df}{dr} = \frac{\kappa}{r}\,f - \frac{Z\alpha}{r}\,g$$

となるから, $g = C_g\,r^a$, $f = C_f\,r^a$ とすると

$$(a+\kappa)\,C_g = Z\alpha\,C_f\,, \qquad (a-\kappa)\,C_f = -\,Z\alpha\,C_g$$

これから

$$a = \pm\,\gamma\,, \qquad \gamma = \sqrt{\kappa^2 - Z^2\alpha^2}$$

以上から

$$g = C_g\,e^{-\rho/2}\rho^\gamma\,(G_1 + G_2)\,, \quad f = C_f\,e^{-\rho/2}\rho^\gamma\,(G_1 - G_2)\,, \qquad \rho = -2ikr \tag{3.2}$$

とおくと, (3.1) は

$$\rho\left(\frac{dG_1}{d\rho} + \frac{dG_2}{d\rho}\right) + (\gamma+\kappa)\,(G_1+G_2)$$
$$-\,\frac{1}{2}\left(1 - \frac{E+m}{ik}\frac{C_f}{C_g}\right)\rho\,G_1 - \frac{1}{2}\left(1 + \frac{E+m}{ik}\frac{C_f}{C_g}\right)\rho\,G_2 - Z\alpha\frac{C_f}{C_g}\,(G_1 - G_2) = 0$$

したがって

$$C_f = \frac{ik}{E+m}C_g = i\sqrt{\frac{E-m}{E+m}}C_g \tag{3.3}$$

すると

$$\rho\left(\frac{dG_1}{d\rho}+\frac{dG_2}{d\rho}\right)+(\gamma+\kappa)\,(G_1+G_2)-\rho\,G_2-i\frac{Z\alpha k}{E+m}\,(G_1-G_2)=0$$

同様にして

$$\rho\left(\frac{dG_1}{d\rho}-\frac{dG_2}{d\rho}\right)+(\gamma-\kappa)\,(G_1-G_2)+\rho\,G_2-i\frac{Z\alpha k}{E-m}\,(G_1+G_2)=0$$

これらの和, 差をとれば

$$\rho\,\frac{dG_1}{d\rho}+(\gamma-i\nu)\,G_1+(\kappa-i\mu)\,G_2=0 \tag{3.4}$$

$$\rho\,\frac{dG_2}{d\rho}+(\gamma+i\nu-\rho)\,G_2+(\kappa+i\mu)\,G_1=0 \tag{3.5}$$

ただし

$$\nu=\frac{Z\alpha E}{k}\,, \qquad \mu=\frac{Z\alpha m}{k}$$

最初の式を ρ で微分し, $dG_2/d\rho$ に第 2 式を代入すると

$$\rho\,\frac{d^2G_1}{d\rho^2}+(1+2\gamma-\rho)\,\frac{dG_1}{d\rho}-(\gamma-i\nu)\,G_1=0 \tag{3.6}$$

同様にして

$$\rho\,\frac{d^2G_2}{d\rho^2}+(1+2\gamma-\rho)\,\frac{dG_2}{d\rho}-(1+\gamma-i\nu)\,G_2=0 \tag{3.7}$$

これらは合流型超幾何微分方程式

$$\left(z\frac{d^2}{dz^2}+(b-z)\frac{d}{dz}-a\right)w(z)=0$$

である。原点で正則な解は

$$w=M(a,b,z)$$

正則でない解は

$$w=z^{1-b}\,M(1+a-b,2-b,z)$$

原点で正則な解

$$G_1(\rho)=C_1\,M(\gamma-i\nu,\,1+2\gamma,\,\rho\,)\,,\quad G_2(\rho)=C_2\,M(1+\gamma-i\nu,\,1+2\gamma,\,\rho\,)$$

これらを (3.4) に代入し

$$z\frac{d}{dz}M(a,b,z)=a\Big(M(a+1,b,z)-M(a,b,z)\Big)$$

を使うと

$$C_2=-\frac{\gamma-i\nu}{\kappa-i\mu}C_1$$

$|-\gamma+i\nu\,|=|\,\kappa-i\mu\,|$ であるから

$$e^{-2i\eta}=\frac{\gamma-i\nu}{\kappa-i\mu}$$

とおき, $M(a,b,z)=e^zM(b-a,b,-z)$ を使うと

$$G_2(\rho)=C_1\,e^{-2i\eta+\rho}M(\gamma+i\nu,\,1+2\gamma,\,-\rho\,)$$

となる。(3.2) に G_1, G_2 を代入すると

$$\left.\begin{matrix} g \\ f \end{matrix}\right\}=C\,e^{-\rho/2}\rho^{\gamma}\left(M(\gamma-i\nu,\,1+2\gamma,\,\rho\,)\mp e^{-2i\eta+\rho}M(\gamma+i\nu,\,1+2\gamma,\,-\rho\,)\right)$$

$$=2Ce^{-i\eta}\rho^{\gamma}\left\{\begin{matrix} i\,\mathrm{Im} \\ \mathrm{Re} \end{matrix}\right\}e^{i\eta-\rho/2}M(\gamma-i\nu,\,1+2\gamma,\,\rho\,)$$

(3.3) を考慮すると, 原点で正則な解は ($\rho=-2ix$)

$$g_r=C_r\,(2x)^{\gamma}\,\mathrm{Im}\,e^{i(x+\eta)}M(\gamma-i\nu,\,1+2\gamma,\,-2ix\,) \tag{3.8}$$

$$f_r=\frac{k}{E+m}\,C_r\,(2x)^{\gamma}\,\mathrm{Re}\,e^{i(x+\eta)}M(\gamma-i\nu,\,1+2\gamma,\,-2ix\,) \tag{3.9}$$

原点で正則でない解

$$G_1(\rho)=C_1\,\rho^{-2\gamma}\,M(-\gamma-i\nu,\,1-2\gamma,\,\rho\,)\,,\quad G_2(\rho)=C_2\,\rho^{-2\gamma}\,M(1-\gamma-i\nu,\,1-2\gamma,\,\rho\,)$$

これらを (3.4) に代入すると

$$C_2=-\,e^{-2i\eta'}\,C_1\,,\qquad e^{-2i\eta'}=\frac{-\gamma-i\nu}{\kappa-i\mu}$$

これから

$$G_2=-\,C_1\,e^{-2i\eta'+\rho}\rho^{-2\gamma}\,M(-\gamma+i\nu,\,1-2\gamma,\,-\rho\,)$$

(3.2) に G_1, G_2 を代入すると

$$\left.\begin{matrix} g \\ f \end{matrix}\right\}=C\,e^{-\rho/2}\rho^{-\gamma}\left(M(-\gamma-i\nu,\,1-2\gamma,\,\rho\,)\mp e^{-2i\eta'+\rho}M(-\gamma+i\nu,\,1-2\gamma,\,-\rho\,)\right)$$

$$=2Ce^{-i\eta'}\rho^{-\gamma}\left\{\begin{matrix} i\,\mathrm{Im} \\ \mathrm{Re} \end{matrix}\right\}e^{i\eta'-\rho/2}M(-\gamma-i\nu,\,1-2\gamma,\,\rho\,)$$

原点で正則でない解は

$$g_i=\frac{C_i}{(2x)^{\gamma}}\,\mathrm{Im}\,e^{i(x+\eta')}M(-\gamma-i\nu,\,1-2\gamma,\,-2ix\,) \tag{3.10}$$

$$f_i=\frac{k}{E+m}\,\frac{C_i}{(2x)^{\gamma}}\,\mathrm{Re}\,e^{i(x+\eta')}M(-\gamma-i\nu,\,1-2\gamma,\,-2ix\,) \tag{3.11}$$

となる。これらは g_r , f_r において γ を $-\gamma$ で置き換えれば得られる。

漸近形

$-3\pi/2<\arg z\leq-\pi/2$ で $|z|\longrightarrow\infty$ のとき

$$M(a,b,z)=\frac{\Gamma(b)}{\Gamma(b-a)}e^{-i\pi a}z^{-a}g(a,a-b+1,-z)+\frac{\Gamma(b)}{\Gamma(a)}e^{z}z^{a-b}g(1-a,b-a,z)$$

ただし

$$g(a,b,z) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(a)_n (b)_n}{n!\, z^n}\,, \qquad (a)_0 = 1\,, \quad (a)_n = a(a+1)\cdots(a+n-1)$$

である。ところで

$$(-2ix)^{-\gamma+i\nu} = \exp\Big((-\gamma+i\nu)(\log 2kr - i\pi/2)\Big) = \frac{e^{\pi\nu/2}}{(2x)^{\gamma}}\,\exp\Big(i\nu\log 2x + i\pi\gamma/2\Big)$$

より

$$\begin{aligned} g_r = C_r \frac{\mathit{\Gamma}(2\gamma+1)\,e^{-\pi\nu/2}}{|\mathit{\Gamma}(1+\gamma+i\nu)|}\,\mathrm{Im}\Big[\, & e^{i(x+\nu\log 2x+\theta_\gamma)}\, g(\gamma-i\nu,-\gamma-i\nu,2ix) \\ & + \frac{i}{2x}\,(\kappa-i\mu)\,e^{-\,i(x+\nu\log 2x+\theta_\gamma)}\, g(1+\gamma+i\nu,1-\gamma+i\nu,-2ix)\Big] \end{aligned}$$

ここで

$$\theta_\gamma = \eta - \frac{\pi}{2}\gamma - \arg\mathit{\Gamma}(1+\gamma+i\nu)\,, \quad e^{-2i\eta} = \frac{\gamma-i\nu}{\kappa-i\mu}$$

したがって

$$C_r = \frac{|\mathit{\Gamma}(1+\gamma+i\nu)|}{\mathit{\Gamma}(1+2\gamma)}\,e^{\pi\nu/2}$$

とすれば

$$\begin{aligned} g_r = \mathrm{Im}\Big[\, & e^{i(x+\nu\log 2x+\theta_\gamma)}\, g(\gamma-i\nu,-\gamma-i\nu,2ix) \\ & + \frac{i}{2x}(\kappa-i\mu)\,e^{-\,i(x+\nu\log 2x+\theta_\gamma)}\, g(1+\gamma+i\nu,1-\gamma+i\nu,-2ix)\Big] \\ & \longrightarrow \sin\Big(x+\nu\log 2x+\delta_\kappa-\pi\ell/2\Big)\,, \quad (\ x\to\infty\ ) \end{aligned}$$

ただし

$$\delta_\kappa = \theta_\gamma + \pi\ell/2 = \eta + \frac{\pi}{2}\Big(\ell-\gamma\Big) - \arg\mathit{\Gamma}(1+\gamma+i\nu)$$

正則でない解は, 正則解で γ を $-\gamma$ で置き換えればよいから

$$\begin{aligned} g_i = \mathrm{Im}\Big[\, & e^{i(x+\nu\log 2x+\theta_{-\gamma})}\, g(\gamma-i\nu,-\gamma-i\nu,2ix) \\ & + \frac{i}{2x}\,(\kappa-i\mu)\,e^{-\,i(x+\nu\log 2x+\theta_{-\gamma})}\, g(1+\gamma+i\nu,1-\gamma+i\nu,-2ix)\Big] \\ & \longrightarrow \sin\Big(x+\nu\log 2x+\delta'_\kappa-\pi\ell/2\Big) \end{aligned}$$

ここで

$$\delta'_\kappa = \theta_{-\gamma} + \pi\ell/2 = \eta' + \frac{\pi}{2}\Big(\ell+\gamma\Big) - \arg\mathit{\Gamma}(1-\gamma+i\nu)\,, \quad e^{-2i\eta'} = \frac{-\gamma-i\nu}{\kappa-i\mu}$$

- D. R. Yennie *et al.*, Phys. Rev. **95** (1954) 500 との関係
  $\kappa = j+1/2$, $g=F$, $f=G$ とすると (3.1) は

  $$\frac{dF}{dr} + \frac{j+1/2}{r}F - (E+m-V(r))\,G = 0\,, \quad \frac{dG}{dr} - \frac{j+1/2}{r}G + (E-m-V(r))\,F = 0$$

  となり, D. R. Yennie *et al.* の (21) 式に一致する。$\ell = j+1/2$ であるから

  $$e^{2i\delta_\kappa} = \frac{\kappa-i\mu}{\gamma-i\nu}\frac{\mathit{\Gamma}(1+\gamma-i\nu)}{\mathit{\Gamma}(1+\gamma+i\nu)}e^{i\pi(j+1/2-\gamma)} = \frac{\kappa-i\mu}{\gamma+i\nu}\frac{\mathit{\Gamma}(\gamma-i\nu)}{\mathit{\Gamma}(\gamma+i\nu)}e^{i\pi(j+1/2-\gamma)}$$

$\mu = 0$ ($m = 0$) のとき, これは D. R. Yennie *et al.* の η^c の定義式 (36) であるから $\delta_\kappa = \eta^c$ となる。したがって, $x \to \infty$ のとき

$$G_R = f_r \longrightarrow \cos\Big(x + \nu \log 2x + \eta^c - \pi\ell/2\Big) = \sin\Big(x + \nu \log 2x + \eta^c - \frac{\pi}{2}(j - 1/2)\Big)$$

で (34) 式になる。$x \longrightarrow 0$ の場合

$$e^{ix} M(\gamma - i\nu, 1 + 2\gamma, -2ix) = (1 + ix + \cdots)\left(1 - 2i\frac{\gamma - i\nu}{1 + 2\gamma}x + \cdots\right) = 1 - \frac{2\nu x}{1 + 2\gamma} + \frac{ix}{1 + 2\gamma}$$

より

$$e^{i(x+\eta)} M(\gamma - i\nu, 1 + 2\gamma, -2ix) = \cos\eta\left[1 - \frac{2\nu + \tan\eta}{1 + 2\gamma}x + i\left(\tan\eta + \frac{1 - 2\nu\tan\eta}{1 + 2\gamma}x\right)\right]$$

ところで

$$\cos\eta = \sqrt{\frac{1 + \cos 2\eta}{2}} = \sqrt{\frac{\kappa + \gamma}{2\kappa}}, \quad \sin\eta = \frac{\kappa}{|\kappa|}\sqrt{\frac{1 - \cos 2\eta}{2}} = \frac{\kappa}{|\kappa|}\sqrt{\frac{\kappa - \gamma}{2\kappa}}$$

であるから

$$\tan\eta = \frac{\kappa}{|\kappa|}\sqrt{\frac{\kappa - \gamma}{\kappa + \gamma}} = \frac{\nu}{\kappa + \gamma}$$

となる。これから

$$\begin{aligned} e^{i(x+\eta)} M(\gamma - i\nu, 1 + 2\gamma, -2ix) = \sqrt{\frac{\kappa + \gamma}{2\kappa}}\Bigg[&1 - \frac{\nu}{1 + 2\gamma}\left(1 + \frac{\gamma + 1 + \kappa}{\gamma + \kappa}\right)x \\ &+ i\left(\frac{\nu}{\kappa + \gamma} + \frac{1}{1 + 2\gamma}\left(\gamma + 1 - \kappa - \frac{\nu^2}{\gamma + \kappa}\right)x\right)\Bigg] \end{aligned}$$

D. R. Yennie *et al.* で $s_j \to \gamma$, $j + 1/2 \to \kappa$, $\gamma \to \nu$ と置き換えると

$$e^{i(x+\eta)} M(\gamma - i\nu, 1 + 2\gamma, -2ix) = \sqrt{\frac{\kappa + \gamma}{2\kappa}}\Big(1 + a_1 x + i(b_0 + b_1 x)\Big)$$

ただし, a_i, b_i は (A17) で定義されたもの。したがって

$$\begin{aligned} &C_r(2x)^\gamma e^{i(x+\eta)} M(\gamma - i\nu, 1 + 2\gamma, -2ix) \\ &= \frac{|\Gamma(1 + \gamma + i\nu)|}{\Gamma(1 + 2\gamma)}\sqrt{\frac{\kappa + \gamma}{2\kappa}}\, e^{\pi\nu/2}\,(2x)^\gamma\Big(1 + a_1 x + i(b_0 + b_1 x)\Big) \\ &= \frac{|\Gamma(\gamma + i\nu)|}{\Gamma(1 + 2\gamma)}\sqrt{\frac{\kappa(\kappa + \gamma)}{2}}\, e^{\pi\nu/2}\,(2x)^\gamma\Big(1 + a_1 x + i(b_0 + b_1 x)\Big) \end{aligned}$$

- 位相差は

$$\delta'_\kappa - \delta_\kappa = \pi\gamma + \eta' - \eta + \arg\Gamma(1 + \gamma + i\nu) - \arg\Gamma(1 - \gamma + i\nu)$$

つまり

$$e^{i(\delta'_\kappa - \delta_\kappa)} = e^{i(\pi\gamma + \eta' - \eta)}\frac{u}{|u|}, \quad u = \frac{\Gamma(1 + \gamma + i\nu)}{\Gamma(1 - \gamma + i\nu)}$$

$\Gamma(z)\,\Gamma(1 - z) = \pi/\sin\pi z$ を使うと

$$u = \frac{1}{\pi}\Gamma(1 + \gamma + i\nu)\,\Gamma(\gamma - i\nu)\sin\pi(1 - \gamma + i\nu) = \frac{|\Gamma(\gamma - i\nu)|^2}{\pi}(\gamma + i\nu)\,\sin\pi(\gamma - i\nu)$$

これら

$$e^{i(\delta'_\kappa-\delta_\kappa)}=e^{i(\pi\gamma+\eta'-\eta)}\,\frac{\gamma+i\nu}{|\gamma+i\nu|}\,\frac{\sin\pi(\gamma-i\nu)}{|\sin\pi(\gamma-i\nu)|}$$

ところで

$$e^{2i(\eta'-\eta)}=-\,\frac{\gamma-i\nu}{\gamma+i\nu}=-\,\frac{(\gamma-i\nu)^2}{|\gamma-i\nu|^2}\,,\qquad i.e.\quad e^{i(\eta'-\eta)}=i\,\frac{\gamma-i\nu}{|\gamma-i\nu|}$$

したがって

$$e^{i(\delta'_\kappa-\delta_\kappa)}=i\,e^{i\pi\gamma}\,\frac{\sin\pi(\gamma-i\nu)}{|\sin\pi(\gamma-i\nu)|}$$

$$\sin\pi(\gamma-i\nu)=\frac{1}{2i}e^{i\pi|\kappa|}\left(e^{\pi\nu}-e^{-\pi\nu}\right)\cos\pi(|\kappa|-\gamma)\Big(1-i\tan\pi(|\kappa|-\gamma)\,\coth\pi\nu\Big)$$

$e^{\pi\nu}-e^{-\pi\nu}>0,\ \cos\pi(|\kappa|-\gamma)>0$ であるから

$$e^{i(\delta'_\kappa-\delta_\kappa)}=e^{i(\pi\gamma-|\kappa|)}\,\frac{1-i\tan\pi(|\kappa|-\gamma)\,\coth\pi\nu}{|1-i\tan\pi(|\kappa|-\gamma)\,\coth\pi\nu|}$$

これは D. R. Yennie の (36) 式である。

- 非相対論的極限では

$$\gamma=\sqrt{\kappa^2-Z^2\alpha^2}\approx|\kappa|\,,\qquad \nu=\frac{Z\alpha E}{k}\approx\frac{Z\alpha m}{k}$$

であるから

$$e^{-2i\eta}=\frac{-\,\gamma+i\nu}{\kappa-iZ\alpha m/k}\approx\frac{-\,|\kappa|+i\nu}{\kappa-i\nu}$$

したがって

$$\eta=\begin{cases}-\,\pi/2\,, & \kappa=\ell>0\\ \arg\left(\ell+1+i\nu\right), & \kappa=-\,(\ell+1)<0\end{cases}$$

$\kappa>0$ のとき $\gamma\approx\kappa=\ell$ であるから

$$\delta_\kappa\approx-\,\frac{\pi}{2}+\frac{\pi}{2}\Big(\ell+1-\ell\Big)-\arg\Gamma(\ell+1+i\nu)=-\arg\Gamma(\ell+1+i\nu)$$

$\kappa=-\,(\ell+1)$ の場合

$$\Gamma(\gamma+1+i\nu)=\Gamma(\ell+2+i\nu)=(\ell+1+i\nu)\Gamma(\ell+1+i\nu)$$

より $\arg\Gamma(\gamma+1+i\nu)=\arg\left(\ell+1+i\nu\right)+\arg\Gamma(\ell+1+i\nu)$ となるから

$$\delta_\kappa\approx-\arg\Gamma(\ell+1+i\nu)$$

3.2 一般のポテンシャル

位相の決定

r が十分大きい場合に $V(r)=-\,Ze^2/r$ となる一般のポテンシャル $V(r)$ に対する (3.1) を数値的に解く。$V(r)=-\,Ze^2/r$ となる領域では, (3.1) の正則解 $G(r)$ は純粋なクーロンポテンシャルの解 $g_r(r)$, $g_i(r)$ を用いて

$$G(r)=C\,g_r(r)+D\,g_i(r)$$

と書ける。$r\to\infty$ では $u(x)=x+\nu\log 2x-\pi\ell/2$ とすると

$$\begin{aligned}G(r)&\to C\,\sin\left(u(x)+\delta_\kappa\right)+D\,\sin\left(u(x)+\delta'_\kappa\right)\\&=\,(C\cos\delta_\kappa+D\cos\delta'_\kappa)\sin u(x)+(C\sin\delta_\kappa+D\sin\delta'_\kappa)\cos u(x)\end{aligned}$$

であるから

$$C\sin\delta_\kappa + D\sin\delta'_\kappa = A\sin\phi_\kappa\,, \qquad C\cos\delta_\kappa + D\cos\delta'_\kappa = A\cos\phi_\kappa$$

とおくと

$$G(r) \to A\sin\left(u(x)+\phi_\kappa\right)$$

となるから, ϕ_κ が $V(r)$ による phase shift を表す。ϕ_κ は

$$\tan\phi_\kappa = \frac{C/D\ \sin\delta_\kappa + \sin\delta'_\kappa}{C/D\ \cos\delta_\kappa + \cos\delta'_\kappa}\,,$$

あるいは

$$\tan(\phi_\kappa - \delta_\kappa) = \frac{\cos\delta_\kappa\tan\phi - \sin\delta_\kappa}{\cos\delta_\kappa + \sin\delta_\kappa\tan\phi} = \frac{\sin(\delta'_\kappa - \delta_\kappa)}{C/D + \cos(\delta'_\kappa - \delta_\kappa)}$$

と表せるから, C/D が求まれば ϕ_κ が決まる。2 点 $r = r_1$, $r = r_2$ における数値解を $G(1)$, $G(2)$ とすると

$$G(1) = C\,g_r(1) + D\,g_i(1)\,, \quad G(2) = C\,g_r(2) + D\,g_i(2)$$

これらの比をとれば

$$\frac{C}{D} = \frac{G(2)\,g_i(1) - G(1)\,g_i(2)}{G(1)\,g_r(2) - G(2)\,g_r(1)}$$

により C/D を決定できる。r_1, r_2 が $V(r) = -Ze^2/r$ となる領域にあれば, C/D は r_1, r_2 に依存しない。

散乱振幅

　非相対論の場合

$$f(\theta) = A(\theta) + B(\theta)\,\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}$$

ただし

$$A(\theta) = \frac{1}{2ik}\sum_{\ell=0}\Big[\,(\ell+1)\left(e^{2i\phi_{\ell\,j=\ell+1/2}} - 1\right) + \ell\left(e^{2i\phi_{\ell\,j=\ell-1/2}} - 1\right)\Big]\,P_\ell(\cos\theta)$$

$$B(\theta) = \frac{1}{2k}\sum_{\ell=0}\left(e^{2i\phi_{\ell\,j=\ell+1/2}} - e^{2i\phi_{\ell\,j=\ell-1/2}}\right)P^1_\ell(\cos\theta)$$

ここで

$$P^1_\ell(x) = \sqrt{1-x^2}\,\frac{dP}{dx}$$

である。したがって, 相対論の場合, $\phi_{\kappa=-\ell-1} = \phi_{-\ell-1}$ と書くことにすると

$$\begin{aligned} A(\theta) &= \frac{1}{2ik}\sum_{\ell=0}\Big[\,(\ell+1)\left(e^{2i\phi_{-\ell-1}} - 1\right) + \ell\left(e^{2i\phi_\ell} - 1\right)\Big]\,P_\ell(\cos\theta) \\ &= \frac{1}{2ik}\sum_{\ell=0}\Big[\,(\ell+1)\,e^{2i\phi_{-\ell-1}} + \ell\,e^{2i\phi_\ell}\,\Big]\,P_\ell(\cos\theta) \\ B(\theta) &= \frac{1}{2k}\sum_{\ell=0}\left(e^{2i\phi_{-\ell-1}} - e^{2i\phi_\ell}\right)P^1_\ell(\cos\theta) \end{aligned}$$

ここで Schiff (21.23)

$$\sum_{\ell=0}(2\ell+1)P_\ell(\cos\theta) = \delta(1-\cos\theta)$$

を使った。

以下では $E \gg m$ であるとして $m = 0$ とする。この場合 (3.1) は

$$\frac{dg_\kappa}{dr} = -\,\frac{\kappa}{r}\,g_\kappa + (E - V(r))\,f_\kappa\,, \qquad \frac{df_\kappa}{dr} = \frac{\kappa}{r}\,f_\kappa - (E - V(r))\,g_\kappa$$

となり

$$\kappa \to -\,\kappa\,, \quad g_\kappa \to g_{-\kappa}\,, \quad f_\kappa \to -\,f_{-\kappa}$$

の置き換えに対して不変であるから

$$\frac{f_\kappa}{g_\kappa} = -\,\frac{g_{-\kappa}}{f_{-\kappa}}$$

$r \to \infty$ での漸近形は

$$g_\kappa \to \sin\Big(kr + 2\log 2kr + \phi_\kappa - \pi\ell_\kappa/2\Big)\,, \quad f_\kappa \to \cos\Big(kr + 2\log 2kr + \phi_\kappa - \pi\ell_\kappa/2\Big)$$

であるから

$$\tan\Big(kr + 2\log 2kr + \phi_\kappa - \pi\ell_\kappa/2\Big) = -\,\cot\Big(kr + 2\log 2kr + \phi_{-\kappa} - \pi\ell_{-\kappa}/2\Big)$$

つまり

$$\phi_\kappa - \pi\ell_\kappa/2 = \phi_{-\kappa} - \pi\ell_{-\kappa}/2 - \pi/2 + n\pi\,, \quad \phi_\kappa = \phi_{-\kappa} + \frac{\pi}{2}\,(\ell_\kappa - \ell_{-\kappa} - 1) + n\pi$$

$\kappa > 0$ のとき $\ell_\kappa = \kappa$, $\ell_{-\kappa} = -\,\kappa - 1$ であるから

$$e^{2i\phi_\kappa} = e^{2i\phi_{-\kappa}}$$

となる。したがって

$$\begin{aligned} A(\theta) &= \frac{1}{2ik}\sum_{\ell=0}\Big[\,(\ell+1)\,e^{2i\phi_{\ell+1}} + \ell\,e^{2i\phi_\ell}\,\Big]\,P_\ell(\cos\theta) \qquad (3.12)\\ &= \frac{1}{2ik}\sum_{\ell=1}\ell\,e^{2i\phi_\ell}\Big(P_\ell(\cos\theta) + P_{\ell-1}(\cos\theta)\Big)\\ B(\theta) &= \frac{1}{2k}\sum_{\ell=0}\big(e^{2i\phi_{\ell+1}} - e^{2i\phi_\ell}\big)\,P^1_\ell(\cos\theta) = \frac{1}{2k}\sum_{\ell=1}e^{2i\phi_\ell}\Big(P^1_{\ell-1}(\cos\theta) - P^1_\ell(\cos\theta)\Big) \end{aligned}$$

漸化式

$$P^1_{\ell-1}(\cos\theta) - P^1_\ell(\cos\theta) = -\,\ell\,\Big(P_\ell(\cos\theta) + P_{\ell-1}(\cos\theta)\Big)\tan\frac{\theta}{2}$$

より

$$B(\theta) = -\,i\tan\frac{\theta}{2}\,A(\theta)$$

となる。これから微分断面積は

$$\sigma(\theta) = |A(\theta)|^2 + |B(\theta)|^2 = \frac{|A(\theta)|^2}{\cos^2(\theta/2)}$$

で与えられる。

$\phi_\kappa = \delta_\kappa + \varDelta\phi_\kappa$ とすると

$$A(\theta) = A_c(\theta) + \frac{1}{2ik}\sum_{\ell=0}\ell\,e^{2i\delta_\ell}\,\big(e^{2i\varDelta\phi_\ell} - 1\big)\,(P_\ell + P_{\ell-1})$$

$$A_c(\theta) = \frac{1}{2ik}\sum_{\ell=0}^{\infty}\ell\,e^{2i\delta_\ell}\,(P_\ell + P_{\ell-1})$$

ℓ がある程度大きくなると $\Delta\phi_\ell \to 0$ になるから, 第 2 項は有限項の和である。一方, 純粋クーロン散乱の寄与は無限大の ℓ まで和をとる必要がある。非相対論の場合には, この無限級数和は

$$A_c(\theta) = \frac{\nu}{2k\sin^2(\theta/2)} \exp\left(i\nu\log\sin^2(\theta/2) + 2i\mathrm{Arg}\varGamma(1-i\nu)\right)$$

と解析的に求められるが, 相対論では求まらない。$\nu = Z\alpha E/k = Z\alpha \to 0$ の極限では, 相対論的 A_c は

$$A_c(\theta) = \frac{\nu\cos^2(\theta/2)}{2k\sin^2(\theta/2)} \exp\left(i\nu\log\sin^2(\theta/2) + 2i\mathrm{Arg}\varGamma(1-i\nu)\right)$$

となり, 断面積は Mott cross section

$$\sigma(\theta) = \frac{\nu^2\cos^2(\theta/2)}{4k^2\sin^4(\theta/2)}$$

になる。

3.3 原子核の電荷分布

Form factor を

$$F_1(q^2) + \frac{\mu}{2M}F_2(q^2)\,\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{\gamma} = G_E(q^2) + \frac{\mu}{2M}\,F_2(q^2)\left(\frac{q^2}{2M} + \boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{\gamma}\right), \quad q^2 = \boldsymbol{q}^2$$

と分割し ($\tau = \mathrm{p}, \mathrm{n}$)

$$\begin{aligned}
\rho_\tau(r) &= \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3}\exp(-i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r})\,\langle 0|\sum_k \exp(i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}_k)|0\rangle \\
&= \langle 0|\sum_k \delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_k)|0\rangle = \sum_\alpha \frac{2j_\alpha+1}{4\pi r^2}\left(G_\alpha^2 + F_\alpha^2\right)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
W_\tau(r) &= \frac{\mu}{2M}\int \frac{d^3q}{(2\pi)^3}\exp(-i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r})\,\langle 0|\sum_k \exp(i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}_k)\left(\frac{q^2}{2M} + \boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{\gamma}_k\right)|0\rangle \\
&= \frac{\mu}{2M}\left(-\frac{1}{2M}\boldsymbol{\nabla}^2\rho_{\mathrm{B}}(r) + i\boldsymbol{\nabla}\cdot\langle 0|\sum_k \delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_k)\,\boldsymbol{\gamma}_k|0\rangle\right)
\end{aligned}$$

を考える。ただし, 波動関数は

$$\psi_{\alpha\,m} = \begin{pmatrix} i\,\dfrac{G_\alpha(r)}{r}\,\mathcal{Y}_{\ell jm} \\ \dfrac{F_\alpha(r)}{r}\dfrac{\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{r}}{r}\,\mathcal{Y}_{\ell jm} \end{pmatrix}, \qquad \alpha = m \text{ 以外の量子数}$$

$$\boldsymbol{\nabla}^2\frac{G^2}{r^2} = \frac{1}{r}\frac{d^2}{dr^2}\frac{G^2}{r} = \frac{2}{r^2}\frac{d}{dr}\left(G\,\frac{dG}{dr} - \frac{G^2}{r}\right)$$

より

$$\boldsymbol{\nabla}^2\rho_{\mathrm{B}}(r) = \sum_\alpha \frac{2j_\alpha+1}{2\pi r^2}\frac{d}{dr}\left(G_\alpha\,\frac{dG_\alpha}{dr} - \frac{G_\alpha^2}{r} + F_\alpha\,\frac{dF_\alpha}{dr} - \frac{F_\alpha^2}{r}\right)$$

Dirac 方程式

$$\frac{dG}{dr} = -\frac{\kappa}{r}G + \Big(\varepsilon - U_0(r) + M^*(r)\Big)F, \quad \frac{dF}{dr} = \frac{\kappa}{r}F + \Big(-\varepsilon + U_0(r) + M^*(r)\Big)G$$

を使うと

$$\boldsymbol{\nabla}^2\rho_{\rm B}(r) = \sum_\alpha \frac{2j_\alpha+1}{2\pi r^2}\frac{d}{dr}\left(-\frac{\kappa_\alpha+1}{r}G_\alpha^2 + \frac{\kappa_\alpha-1}{r}F_\alpha^2 + 2M^*G_\alpha F_\alpha\right)$$

一方

$$i\boldsymbol{\nabla}\cdot\langle 0|\sum_k \delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_k)\,\boldsymbol{\gamma}_k|0\rangle = \boldsymbol{\nabla}\cdot\sum_{\alpha,m}\frac{G_\alpha F_\alpha}{r^2}\,\mathcal{Y}_{jm}^\dagger\frac{\boldsymbol{\sigma}\,\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{r}+\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{r}\,\boldsymbol{\sigma}}{r}\mathcal{Y}_{jm}$$

$$= \boldsymbol{\nabla}\cdot\frac{\boldsymbol{r}}{r}\sum_\alpha\frac{2j_\alpha+1}{2\pi r^2}\,G_\alpha F_\alpha = \sum_\alpha\frac{2j_\alpha+1}{2\pi r^2}\,\frac{d}{dr}\,G_\alpha F_\alpha$$

以上から

$$W_\tau(r) = \frac{\mu}{M}\sum_\alpha\frac{2j_\alpha+1}{4\pi r^2}\,\frac{d}{dr}\left(\frac{M-M^*}{M}\,G_\alpha F_\alpha + \frac{\kappa_\alpha+1}{2Mr}\,G_\alpha^2 - \frac{\kappa_\alpha-1}{2Mr}\,F_\alpha^2\right)$$

$M^* = M$ とし F^2 を無視すると

$$W_\tau(r) \approx \frac{\mu}{2M^2r^2}\frac{d}{dr}\,r\sum_\alpha\frac{2j_\alpha+1}{4\pi r^2}\,(\kappa_\alpha+1)\;G_\alpha^2$$

$$\approx -\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\,r\,\langle 0|\frac{\mu}{2M^2}\sum_k\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_k)\,\boldsymbol{\sigma}_k\cdot\boldsymbol{\ell}_k|0\rangle$$

となり, Negele の結果になる。

$\rho_\tau(r)$, $W_\tau(r)$ を使うと

$$\langle 0|\hat\rho(q)|0\rangle = \langle 0|\sum_k\exp(i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}_k)\left(F_1(q^2)+\frac{\mu}{2M}F_2(q^2)\,\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{\gamma}_k\right)|0\rangle$$

$$= \int d^3x\,\exp(i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{x})\Big(G_E(q)\,\rho_\tau(x)+F_2(q)\,W_\tau(x)\Big)$$

$$= \int d^3x\,d^3y\;\exp(i\boldsymbol{q}\cdot(\boldsymbol{x}+\boldsymbol{y}))\Big(G_E(y)\,\rho_\tau(x)+F_2(y)\,W_\tau(x)\Big)$$

ここで

$$F(r) = \int\frac{d^3q}{(2\pi)^3}\exp(-i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r})\,F(q)$$

したがって

$$\rho_c(r) = \int\frac{d^3q}{(2\pi)^3}\;\exp(-\,i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r})\,\langle 0|\hat\rho(q)|0\rangle$$

$$= \int d^3x\,d^3y\,\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y})\Big(G_E(y)\,\rho_\tau(x)+F_2(y)\,W_\tau(x)\Big)$$

$$= \frac{2\pi}{r}\int_0^\infty dx\,x\int_{|r-x|}^{r+x}dy\,y\,\Big(G_E(y)\,\rho_\tau(x)+F_2(y)\,W_\tau(x)\Big)$$

$$= \frac{1}{r}\int_0^\infty dx\,x\left[\Big(g(|r-x|)-g(r+x)\Big)\rho_\tau(x)+\Big(f_2(|r-x|)-f_2(r+x)\Big)W_\tau(x)\right]$$

$$= \rho_{c\tau}(r)+W_{c\tau}(r)$$

ただし, g, f_2 は 1 次元のフーリエ変換

$$g(x) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^\infty dq\,e^{iqx}G_E(q)\,,\quad f_2(x) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^\infty dq\,e^{iqx}F_2(q)$$

3.4 Nucleon form factor

D. H. Lu *et al.*, Phys. Rev. **C57** (1998) 2628, nucl–th/9706019 で引用の実験データから

$$G_{Ep} = G_p = \frac{1}{\left(1 + r_p^2 q^2/12\right)^2}\,, \quad G_{Mp} = (1+\mu_p) G_p\,, \quad G_{Mn} = \mu_n G_p$$

としてよい。ただし

$$\mu_p = 1.793\,, \quad \mu_n = -\,1.913\,, \quad r_p = \langle r^2 \rangle^{1/2} = 0.81\,\mathrm{fm}$$

一方

$$G_n = G_{En} = \frac{1}{\left(1 + r_+^2 q^2/12\right)^2} - \frac{1}{\left(1 + r_-^2 q^2/12\right)^2}\,, \quad r_\pm^2 = r_n^2 \mp 0.06\,\mathrm{fm}^2$$

とすると, 実験データから $0.8\,\mathrm{fm} < r_n < 1.0\,\mathrm{fm}$ (最後の図)

$$F_1 = \frac{G_E + q^2/4M^2\, G_M}{1 + q^2/4M^2}\,, \quad \mu\, F_2 = \frac{G_M - G_E}{1 + q^2/4M^2}$$

から

$$F_{2p} = \frac{G_p}{1 + q^2/4M^2}\,, \qquad F_{2n} = \frac{G_p - G_n/\mu_n}{1 + q^2/4M^2}$$

$x \geq 0$ のとき

$$\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} dq\, \frac{e^{iqx}}{\left(1 + q^2/\lambda^2\right)^2} = \frac{1}{4}\lambda(1 + \lambda x) e^{-\lambda x}$$

$$\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} dq\, \frac{e^{iqx}}{(1 + q^2/4M^2)\left(1 + q^2/\lambda^2\right)^2} = \frac{\lambda M^2}{4M^2 - \lambda^2}\left[\left(1 + \lambda x - \frac{2\lambda^2}{4M^2 - \lambda^2}\right) e^{-\lambda x} + \frac{\lambda}{M}\frac{\lambda^2}{4M^2 - \lambda^2} e^{-2Mx}\right]$$

4　電子散乱と応答関数

T. DeForest and J. D. Walecka, Adv. Phys. **15** (1966) 1

B. Frois and C. N. Papanicolas, Ann. Rev. Nucl. Part. Sci. **37** (1987) 133

S. Boffi, C. Giusti and F. D. Pacati, Phys. Rep. **226** (1993) 1

4.1　遷移確率

電磁相互作用は弱いので 1 光子交換による電子散乱を考える。入射電子のエネルギー, 運動量を ϵ_1, $\boldsymbol{p}_1$, 散乱電子のエネルギー, 運動量を ϵ_2, $\boldsymbol{p}_2$ とすると

$$\text{エネルギー}\ q_0 = \epsilon_1 - \epsilon_2\,, \quad \text{運動量}\ \boldsymbol{q} = \boldsymbol{p}_1 - \boldsymbol{p}_2$$

の仮想光子 γ が原子核と相互作用する。光子の場 $A_\mu(x)$ を量子化してもよいが, ここでは $A_\mu(x)$ を原子核が作る電磁ポテンシャルとし, このポテンシャルで電子が散乱すると考える。実光子 (real photon) の場合 $q_0 = q$ であるが, 電子散乱では ($\epsilon = \sqrt{m_e^2 + p^2}$, $m_e =$ 電子の質量)

$$q_\mu^2 = (\epsilon_1 - \epsilon_2)^2 - (\boldsymbol{p}_1 - \boldsymbol{p}_2)^2 = 2\left(m_e^2 + \boldsymbol{p}_1\!\cdot\!\boldsymbol{p}_2 - \epsilon_1\epsilon_2\right) \le 2\left(m_e^2 + p_1 p_2 - \epsilon_1\epsilon_2\right)$$

ところで

$$\left(m_e^2 + p_1 p_2\right)^2 - \epsilon_1^2\epsilon_2^2 = -\,m_e^2\,(p_1 - p_2)^2 \le 0$$

であるから $q_\mu^2 \le 0$ になる。電子散乱では $q_0 \le q$ であれば q_0 と $\boldsymbol{q}$ を独立に変えることができる。これは原子核を調べる上で大きな利点である。例えば, (4.17) で示すように, 弾性散乱 ($q_0 = 0$) において $\boldsymbol{q}$ を変化させることで原子核の電荷分布 (のフーリエ変換) が実験的に求まる。

電子の場を $\psi(x)$, 電荷を $-e$ とすると, 原子核と電子の相互作用は

$$V(x_0) = -\,e\int d^3x\, j^\mu(x) A_\mu(x)\,, \qquad j^\mu(x) = \overline{\psi}(x)\gamma^\mu\psi(x)\,, \qquad x^\mu = (x^0, \boldsymbol{x})$$

である。時刻 $x_0 = -\infty$ での電子の初期状態を $|\boldsymbol{p}_1\sigma_1\rangle$, $x_0 = +\infty$ での終状態を $|\boldsymbol{p}_2\sigma_2\rangle$ とする。$\sigma = \pm 1$ は電子のスピン状態を表す。一方, 原子核の初期状態, 終状態をそれぞれ $|\,0\,\rangle$, $|\,n\,\rangle$ とする。V を時間に依存する 1 次の摂動で扱うと, $|\boldsymbol{p}_1\sigma_1,\,0\,\rangle \to |\boldsymbol{p}_2\sigma_2,\,n\,\rangle$ の遷移確率は $|w|^2$

$$w = \int_{-\infty}^{\infty} dx_0\,\langle \boldsymbol{p}_2\sigma_2, n|V(x_0)|\boldsymbol{p}_1\sigma_1, 0\rangle = -\,e\int d^4x\,\langle \boldsymbol{p}_2\sigma_2|j^\mu(x)|\boldsymbol{p}_1\sigma_1\rangle\langle n|A_\mu(x)|0\rangle \tag{4.1}$$

である。電子の場 $\psi(x)$ は

$$\psi(x) = \sum_\sigma \int \frac{d^3p}{(2\pi)^{3/2}}\sqrt{\frac{m_e}{\epsilon}}\Big(a(\boldsymbol{p},\sigma)u(\boldsymbol{p},\sigma)\,e^{-ip\cdot x} + b^\dagger(\boldsymbol{p},\sigma)v(\boldsymbol{p},\sigma)\,e^{ip\cdot x}\Big)\,, \quad p\!\cdot\! x = p^\mu x_\mu \tag{4.2}$$

と展開できる。ここで $a^\dagger$ は電子の生成演算子, $b^\dagger$ は陽電子 (反電子) の生成演算子である。u と v は 4 成分スピノールであり, 規格化は

$$\overline{u}(\boldsymbol{p},\sigma)u(\boldsymbol{p},\sigma') = \delta_{\sigma\sigma'}\,, \qquad \overline{v}(\boldsymbol{p},\sigma)v(\boldsymbol{p},\sigma') = -\,\delta_{\sigma\sigma'}$$

である。ψ の展開式を用いると ($b\,b^\dagger$ は無視, あるいは, 正規積 : $j^\mu(x)$: を考える)

$$\langle \boldsymbol{p}_2\sigma_2|j^\mu(x)|\boldsymbol{p}_1\sigma_1\rangle = \sum_{\sigma\sigma'}\int \frac{d^3p\,d^3p'}{(2\pi)^3}\frac{m_e}{\sqrt{\epsilon\epsilon'}}\,\overline{u}(\boldsymbol{p},\sigma)\gamma^\mu u(\boldsymbol{p}',\sigma')\,e^{i(p-p')\cdot x}$$
$$\times\,\langle\mathrm{vac}|a(\boldsymbol{p}_2,\sigma_2)a^\dagger(\boldsymbol{p},\sigma)a(\boldsymbol{p}',\sigma')a^\dagger(\boldsymbol{p}_1,\sigma_1)|\mathrm{vac}\rangle$$

ただし $|\,\mathrm{vac}\,\rangle$ は真空を表す。

$$\langle \mathrm{vac}|a(\boldsymbol{p}_2,\sigma_2)a^\dagger(\boldsymbol{p},\sigma)a(\boldsymbol{p}',\sigma')a^\dagger(\boldsymbol{p}_1,\sigma_1)|\mathrm{vac}\rangle = \delta(\boldsymbol{p}_2-\boldsymbol{p})\delta_{\sigma_2\sigma}\,\delta(\boldsymbol{p}_1-\boldsymbol{p}')\delta_{\sigma_1\sigma'}$$

であるから

$$\langle \boldsymbol{p}_2\sigma_2|j^\mu(x)|\boldsymbol{p}_1\sigma_1\rangle = \frac{\varGamma^\mu(1,2)}{(2\pi)^3}\,e^{i(p_2-p_1)\cdot x}\,,\quad \varGamma^\mu(1,2)=\frac{m_e}{\sqrt{\epsilon_1\epsilon_2}}\overline{u}(\boldsymbol{p}_2,\sigma_2)\gamma^\mu u(\boldsymbol{p}_1,\sigma_1) \tag{4.3}$$

になる。(4.3) を (4.1) に代入すると

$$w=-\frac{e}{(2\pi)^3}\varGamma^\mu(1,2)\int d^4x\,e^{-iq\cdot x}\,\langle n|A_\mu(x)|0\rangle\,,\qquad q^\mu=p_1^\mu-p_2^\mu$$

原子核の電磁カレントを $eJ^\mu(x)$ とすると Maxwell 方程式は $\Box A^\mu(x)=eJ^\mu(x)$ である。この両辺に $\exp(-iq\cdot x)$ をかけ積分すると

$$\int d^4x\,e^{-iq\cdot x}\Box A^\mu(x)=-\,q_\mu^2\int d^4x\,e^{-iq\cdot x}A_\mu(x)=e\int d^4x\,e^{-iq\cdot x}J^\mu(x)$$

であるから

$$w=\frac{4\pi\alpha}{(2\pi)^3}\frac{\varGamma^\mu(1,2)}{q_\mu^2}\int d^4x\,e^{-iq\cdot x}\langle n|J_\mu(x)|0\rangle\,,\qquad \alpha=\frac{e^2}{4\pi}=\text{微細構造定数}$$

になる。H を原子核のハミルトニアンとする：

$$H|\,0\,\rangle=E_0|\,0\,\rangle\,,\quad H|\,n\,\rangle=E_n|\,n\,\rangle$$

$J_\mu(\boldsymbol{x})=J_\mu(0,\boldsymbol{x})$ とすると, ハイゼンベルクの運動方程式から

$$J_\mu(x)=J_\mu(x_0,\boldsymbol{x})=\exp(iHx_0)J_\mu(\boldsymbol{x})\exp(-iHx_0)$$

である。したがって

$$\langle n|J_\mu(x)|0\rangle=e^{i\omega_n x_0}\langle n|J_\mu(\boldsymbol{x})|0\rangle\,,\qquad \omega_n=E_n-E_0$$

になるから

$$\begin{aligned}
w&=\frac{\alpha}{2\pi^2}\frac{\varGamma^\mu(1,2)}{q_\mu^2}\int d^4x\,e^{i\omega_n x_0-iq\cdot x}\langle n|J_\mu(\boldsymbol{x})|0\rangle\\
&=\frac{\alpha}{2\pi^2}\frac{\varGamma^\mu(1,2)}{q_\mu^2}\int_{-\infty}^{\infty}dx_0\,e^{i(\omega_n-q_0)x_0}\langle n|J_\mu(\boldsymbol{q})|0\rangle\\
&=\frac{\alpha}{\pi}\frac{\varGamma^\mu(1,2)}{q_\mu^2}\,\delta(\omega_n-q_0)\,\langle n|J_\mu(\boldsymbol{q})|0\rangle\,,\quad \text{ただし}\quad J_\mu(\boldsymbol{q})=\int d^3x\exp(i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{x})J_\mu(\boldsymbol{x})
\end{aligned}$$

$\delta(\omega_n-q_0)=\delta(E_n+\epsilon_2-E_0-\epsilon_1)$ はエネルギー保存則である。遷移確率は

$$|w|^2=\frac{\alpha^2}{\pi^2 q_\mu^4}\Big|\varGamma^\mu(1,2)\langle n|J_\mu(\boldsymbol{q})|0\rangle\Big|^2\delta^2(\omega_n-q_0)$$

デルタ関数の 2 乗は $T\to\infty$ として

$$\delta^2(\omega_n-q_0)=\delta(\omega_n-q_0)\,\delta(0)=\delta(\omega_n-q_0)\int_{-T/2}^{T/2}\frac{dx_0}{2\pi}=\delta(\omega_n-q_0)\frac{T}{2\pi}$$

と見なせるから, 単位時間あたりの遷移確率は

$$\frac{|w|^2}{T}=\frac{\alpha^2}{2\pi^3 q_\mu^4}\Big|\varGamma^\mu(1,2)\langle n|J_\mu(\boldsymbol{q})|0\rangle\Big|^2\delta(\omega_n-q_0)$$

になる。

4.2　微分断面積

入射電子が単位体積あたり N_1 個, 標的に対して速さ v_1 で入射するとき, 散乱電子が $\boldsymbol{p}_2$ 近傍の微小領域 d^3p_2 に単位時間に散乱される個数を N_2 個とする。このとき

$$N_2 = N_1 v_1\, d\sigma$$

で定義される $d\sigma$ が微分断面積である。電子の波動関数の規格化を周期的境界条件を用いて体積 V の箱で規格化する。体積 V に 1 つの電子が存在するから, $N_1 = 1/V$ である。また, (4.2) で

$$\frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \to \frac{1}{\sqrt{V}}$$

の置き換えをするから

$$\frac{|w|^2}{T} = \frac{(2\pi)^6}{V^2} \times \frac{\alpha^2}{2\pi^3 q_\mu^4} \Big| \Gamma^\mu(1,2)\langle n|J_\mu(\boldsymbol{q})|0\rangle \Big|^2 \delta(\omega_n - q_0)$$

$\boldsymbol{p}_2$ 近傍の微小領域 d^3p_2 の状態数は $\dfrac{V}{(2\pi)^3}\, d^3p_2$ であるから $N_2 = \dfrac{|w|^2}{T}\dfrac{V}{(2\pi)^3}\, d^3p_2$ になる。したがって

$$d\sigma(\boldsymbol{p}_1\sigma_1, 0 \to \boldsymbol{p}_2\sigma_2, n) = \frac{N_2}{N_1 v_1} = \frac{4\alpha^2}{v_1 q_\mu^4} \Big| \Gamma^\mu(1,2)\langle n|J_\mu(\boldsymbol{q})|0\rangle \Big|^2 \delta(\omega_n - q_0)\, d^3p_2 \tag{4.4}$$

あるいは

$$d^3p_2 = dp_2\, p_2^2\, d\Omega = p_2 \epsilon_2\, d\epsilon_2\, d\Omega\,, \qquad \epsilon_2 = \sqrt{m_e^2 + p_2^2}$$

及び $v_1 = p_1/\epsilon_1$ より二重微分断面積は

$$\frac{d^2\sigma(\boldsymbol{p}_1\sigma_1, 0 \to \boldsymbol{p}_2\sigma_2, n)}{d\epsilon_2 d\Omega} = \frac{4\alpha^2 \epsilon_1 \epsilon_2}{q_\mu^4} \frac{p_2}{p_1} \Big| \Gamma^\mu(1,2)\langle n|J_\mu(\boldsymbol{q})|0\rangle \Big|^2 \delta(\omega_n - q_0)$$

である。

入射電子のスピン σ_1 はランダム (偏極していない) で散乱電子のスピン σ_2 を測定しない場合, σ_1 について平均し σ_2 については和をとるから

$$\frac{d^2\sigma(\boldsymbol{p}_1, 0 \to \boldsymbol{p}_2, n)}{d\epsilon_2 d\Omega} = \frac{1}{2}\sum_{\sigma_1\sigma_2} \frac{d^2\sigma(\boldsymbol{p}_1\sigma_1, 0 \to \boldsymbol{p}_2\sigma_2, n)}{d\epsilon_2 d\Omega} = \frac{2\alpha^2}{q_\mu^4}\frac{p_2}{p_1}\, I\, \delta(\omega_n - q_0) \tag{4.5}$$

ただし

$$I = \epsilon_1\epsilon_2 \sum_{\sigma_1\sigma_2} \Big| \Gamma^\mu(1,2)\langle n|J_\mu(\boldsymbol{q})|0\rangle \Big|^2 = m_e^2 \sum_{\sigma_1\sigma_2} \Big| \overline{u}_2 \gamma^\mu u_1 K_\mu \Big|^2$$

ここで, 簡単のため

$$u_1 = u(\boldsymbol{p}_1, \sigma_1)\,, \qquad u_2 = u(\boldsymbol{p}_2, \sigma_2)\,, \qquad K_\mu = \langle n|J_\mu(\boldsymbol{q})|0\rangle$$

とした。

$$(\overline{u}_2\gamma^\mu u_1)^* = u_1^\dagger (\gamma^\mu)^\dagger \gamma^0 u_2 = \overline{u}_1 \gamma^\mu u_2\,, \qquad \Lambda(\boldsymbol{p}) = \sum_\sigma u(\boldsymbol{p},\sigma)\overline{u}(\boldsymbol{p},\sigma) = \frac{\not{p} + m_e}{2m_e}$$

を使うと

$$\begin{aligned} I = m_e^2 \sum_{\sigma_1\sigma_2} \overline{u}_2 \gamma^\mu u_1\, \overline{u}_1 \gamma^\nu u_2 K_\mu K_\nu^* &= m_e^2\, \mathrm{Tr}\Big(\gamma^\mu \Lambda(\boldsymbol{p}_1)\gamma^\nu \Lambda(\boldsymbol{p}_2)\Big) K_\mu K_\nu^* \\ &= \frac{1}{4}\mathrm{Tr}\Big(\gamma^\mu(\not{p}_1 + m_e)\gamma^\nu(\not{p}_2 + m_e)\Big) K_\mu K_\nu^* \\ &= \Big(g^{\mu\nu}\left(m_e^2 - p_1\!\cdot\! p_2\right) + p_1^\mu p_2^\nu + p_1^\nu p_2^\mu\Big) K_\mu K_\nu^* \end{aligned} \tag{4.6}$$

更に $Q^\mu = (p_1^\mu + p_2^\mu)/2$ とすると

$$q_\mu^2 = (p_2 - p_1)_\mu^2 = p_{2\mu}^2 + p_{1\mu}^2 - 2p_1{\cdot}p_2 = 2m_e^2 - 2p_1{\cdot}p_2\,, \qquad p_1^\mu p_2^\nu + p_1^\nu p_2^\mu = 2Q^\mu Q^\nu - \frac{1}{2}q^\mu q^\nu$$

であるから

$$I = \frac{q_\mu^2}{2}K{\cdot}K^* + 2Q{\cdot}K\,Q{\cdot}K^* - \frac{1}{2}q{\cdot}K\,q{\cdot}K^*$$

になる。カレント保存則 $\partial^\mu J_\mu(x) = 0$ は

$$\begin{aligned}\partial^\mu J_\mu(x) &= \frac{\partial}{\partial x_0}\exp(iHx_0)J_0(\boldsymbol{x})\exp(-iHx_0) + \exp(iHx_0)\boldsymbol{\nabla}{\cdot}\boldsymbol{J}(\boldsymbol{x})\exp(-iHx_0)\\ &= \exp(iHx_0)\Big(i\,(HJ_0(\boldsymbol{x}) - J_0(\boldsymbol{x})H) + \boldsymbol{\nabla}{\cdot}\boldsymbol{J}(\boldsymbol{x})\Big)\exp(-iHx_0)\end{aligned}$$

より

$$HJ_0(\boldsymbol{x}) - J_0(\boldsymbol{x})H - i\boldsymbol{\nabla}{\cdot}\boldsymbol{J}(\boldsymbol{x}) = 0$$

である。これから

$$(E_n - E_0)\,\langle n|J_0(\boldsymbol{x})|0\rangle - i\boldsymbol{\nabla}{\cdot}\langle n|\boldsymbol{J}(\boldsymbol{x})|0\rangle = 0$$

$\exp(i\boldsymbol{q}{\cdot}\boldsymbol{x})$ をかけて積分し $E_n - E_0 = \omega_n = q_0$ を使うと

$$q^\mu\langle n|J_\mu(\boldsymbol{q})|0\rangle = 0\,,\quad \text{つまり}\quad q{\cdot}K = 0$$

である。したがって $I = \frac{q_\mu^2}{2}K{\cdot}K^* + 2Q{\cdot}K\,Q{\cdot}K^*$ になるから, これを (4.5) に代入すれば

$$\frac{d^2\sigma(\boldsymbol{p}_1, 0 \to \boldsymbol{p}_2, n)}{d\epsilon_2\,d\Omega} = \frac{2\alpha^2}{q_\mu^4}\frac{p_2}{p_1}\left(\frac{q_\mu^2}{2}K{\cdot}K^* + 2Q{\cdot}K\,Q{\cdot}K^*\right)\delta(\omega_n - q_0) \tag{4.7}$$

である。

4.3 縦方向と横方向の分離

$\boldsymbol{q}$ は運動量移行 (電子から原子核に移行する運動量) である。$\boldsymbol{J}(\boldsymbol{q})$ を $\boldsymbol{q}$ の方向 (縦方向) と $\boldsymbol{q}$ に垂直な方向 (横方向) に分ける。$\boldsymbol{e}_q = \boldsymbol{q}/q$ とすると

$$\boldsymbol{J}(\boldsymbol{q}) = \boldsymbol{e}_q J_{\rm L}(\boldsymbol{q}) + \boldsymbol{J}_{\rm T}(\boldsymbol{q})\,, \qquad J_{\rm L} = \boldsymbol{e}_q{\cdot}\boldsymbol{J}\,,\quad \boldsymbol{J}_{\rm T} = \boldsymbol{e}_q{\times}(\boldsymbol{J}{\times}\boldsymbol{e}_q)$$

これに対応して

$$\boldsymbol{K} = \boldsymbol{e}_q K_{\rm L} + \boldsymbol{K}_{\rm T}$$

である。カレント保存 $q{\cdot}K = q_0K_0 - \boldsymbol{q}{\cdot}\boldsymbol{K} = q_0K_0 - qK_{\rm L} = 0$ より $K_{\rm L} = q_0K_0/q$ になるから

$$K{\cdot}K^* = |K_0|^2 - |K_{\rm L}|^2 - |\boldsymbol{K}_{\rm T}|^2 = -\frac{q_\mu^2}{q^2}|K_0|^2 - |\boldsymbol{K}_{\rm T}|^2$$

$$Q{\cdot}K = Q_0K_0 - \boldsymbol{Q}{\cdot}\boldsymbol{e}_qK_{\rm L} - \boldsymbol{Q}{\cdot}\boldsymbol{K}_{\rm T} = \frac{Q_0q^2 - q_0\,\boldsymbol{Q}{\cdot}\boldsymbol{q}}{q^2}K_0 - \boldsymbol{Q}{\cdot}\boldsymbol{K}_{\rm T} = -\frac{Q_0q_\mu^2}{q^2}K_0 - \boldsymbol{Q}{\cdot}\boldsymbol{K}_{\rm T}$$

$Q{\cdot}K$ の最後では

$$Q{\cdot}q = \frac{(p_1 + p_2){\cdot}(p_1 - p_2)}{2} = \frac{p_{1\mu}^2 - p_{2\mu}^2}{2} = \frac{m_e^2 - m_e^2}{2} = 0\,,\quad \text{つまり}\quad \boldsymbol{Q}{\cdot}\boldsymbol{q} = Q_0q_0$$

を使った。したがって

$$\frac{q_\mu^2}{2}K\cdot K^* + 2Q\cdot K\,Q\cdot K^* = \frac{4Q_0^2-q^2}{2}\left(\frac{q_\mu^2}{q^2}\right)^2 |K_0|^2 - \frac{q_\mu^2}{2}|\boldsymbol{K}_\mathrm{T}|^2 + 2\boldsymbol{Q}\cdot\boldsymbol{K}_\mathrm{T}\,\boldsymbol{Q}\cdot\boldsymbol{K}_\mathrm{T}^* + \frac{Q_0 q_\mu^2}{q^2}\Big(K_0\boldsymbol{Q}\cdot\boldsymbol{K}_\mathrm{T}^* + K_0^*\boldsymbol{Q}\cdot\boldsymbol{K}_\mathrm{T}\Big) \tag{4.8}$$

$\boldsymbol{q}$ に直交する方向は 2 つある。$\boldsymbol{q}$ の方向が z 軸の場合

$$\boldsymbol{e}_{\pm1} = \mp\frac{\boldsymbol{e}_x \pm i\boldsymbol{e}_y}{\sqrt{2}}\,, \qquad \boldsymbol{e}_\lambda^*\cdot\boldsymbol{e}_{\lambda'} = \delta_{\lambda\lambda'}$$

とすると

$$\boldsymbol{K}_\mathrm{T} = \boldsymbol{e}_x K_x + \boldsymbol{e}_y K_y = \sum_{\lambda=\pm1}\boldsymbol{e}_\lambda^* K_\lambda\,, \qquad K_{\pm1} = \boldsymbol{e}_{\pm1}\cdot\boldsymbol{K}_\mathrm{T}$$

である。散乱前には静止していた原子核は, 散乱後は運動量保存のため静止しない。しかし, 原子核は電子に比べれば非常に重いので散乱後も静止しているとし, recoil の効果を無視してもよい近似である。この場合, 散乱前後で, 原子核の状態を角運動量の固有状態で指定できる。$|\,0\,\rangle = |\,I_0 M_0\,\rangle$, $|\,n\,\rangle = |\,I_n M_n\,\rangle$ とする。I は角運動量の大きさ, M は角運動量の z 成分の固有値である。J_λ ($\lambda =$ 0, ±1) は $\boldsymbol{q}$ 方向の角運動量成分の固有値を λ だけ変えるから, $\lambda = \pm1$ のとき $K_0 K_\lambda^* \neq 0$ になる遷移は存在しない。したがって (4.8) の右辺の最後の 2 項は 0 になる。また

$$\sum_{M_0 M_n} K_\lambda K_{\lambda'}^* = \delta_{\lambda\lambda'}\mathcal{K}\,, \quad \mathcal{K} = \sum_{M_0 M_n}|K_\lambda|^2 = \lambda \text{ に依存しない} \tag{4.9}$$

が成り立つ。これから

$$\sum_{M_0 M_n}\boldsymbol{Q}\cdot\boldsymbol{K}_\mathrm{T}\,\boldsymbol{Q}\cdot\boldsymbol{K}_\mathrm{T}^* = \Big(|Q_+|^2 + |Q_-|^2\Big)\mathcal{K} = \frac{Q^2 - Q_z^2}{2}\sum_{M_0 M_n}|\boldsymbol{K}_\mathrm{T}|^2$$

したがって

$$\sum_{M_0 M_n}\left(\frac{q_\mu^2}{2}K\cdot K^* + 2Q\cdot K\,Q\cdot K^*\right) = V_\mathrm{L}\sum_{M_0 M_n}|K_0|^2 + V_\mathrm{T}\sum_{M_0 M_n}|\boldsymbol{K}_\mathrm{T}|^2 \tag{4.10}$$

ただし

$$V_\mathrm{L} = \frac{4Q_0^2 - q^2}{2}\left(\frac{q_\mu^2}{q^2}\right)^2, \qquad V_\mathrm{T} = Q^2 - \frac{(\boldsymbol{Q}\cdot\boldsymbol{q})^2}{q^2} - \frac{q_\mu^2}{2} = Q^2 - \frac{(Q_0 q_0)^2}{q^2} - \frac{q_\mu^2}{2} \tag{4.11}$$

始状態と終状態の M が不定の場合, 電子のスピンと同様に, M_0 については平均し M_n については和をとる。(4.7) と (4.10) から

$$\begin{aligned}\frac{d^2\sigma(\boldsymbol{p}_1, I_0 \to \boldsymbol{p}_2, I_n)}{d\epsilon_2\,d\Omega} &= \frac{1}{2I_0+1}\frac{2\alpha^2}{q_\mu^4}\frac{p_2}{p_1}\sum_{M_0 M_n}\left(\frac{q_\mu^2}{2}K\cdot K^* + 2Q\cdot K\,Q\cdot K^*\right)\delta(\omega_n - q_0)\\ &= \frac{1}{2I_0+1}\frac{2\alpha^2}{q_\mu^4}\frac{p_2}{p_1}\sum_{M_0 M_n}\left(V_\mathrm{L}\Big|\langle n|J_0(\boldsymbol{q})|0\rangle\Big|^2 + V_\mathrm{T}\Big|\langle n|\boldsymbol{J}_\mathrm{T}(\boldsymbol{q})|0\rangle\Big|^2\right)\delta(\omega_n - q_0)\end{aligned}$$

になる。

反応の終状態で, 特定の粒子だけの状態を指定し, そのほかは何でもよいとする。このような反応を inclusive reaction という。一方, 終状態の全ての粒子の状態を指定する反応を exclusive reaction

という。電子散乱で, 終状態では散乱電子の運動量のみを指定する inclusive reaction を考える。原子核の始状態が $I_0 = 0$ の基底状態の場合, 微分断面積は上式から

$$\frac{d^2\sigma}{d\epsilon_2\, d\Omega} = \frac{2\alpha^2}{q_\mu^4}\frac{p_2}{p_1}\Big(V_{\rm L} R_{\rm L}(q_0,q) + V_{\rm T} R_{\rm T}(q_0,q)\Big)$$

ただし

$$R_{\rm L}(q_0,q) = \sum_n \Big|\langle n|J_0(\boldsymbol{q})|0\rangle\Big|^2 \delta(\omega_n - q_0)\,, \quad R_{\rm T}(q_0,q) = \sum_n \Big|\langle n|\boldsymbol{J}_{\rm T}(\boldsymbol{q})|0\rangle\Big|^2 \delta(\omega_n - q_0) \tag{4.12}$$

になる。$R_{\rm L}$ を縦方向応答関数 (longitudinal response function), $R_{\rm T}$ を横方向応答関数 (transverse response function) という。和は全ての H の固有状態 $|\,n\,\rangle$ について行う。

原子核構造を調べる場合, 電子のエネルギー ϵ は数百 MeV 程度である。これは $m_e = 0.511\,{\rm MeV}$ に比べれば非常に大きい。このとき $\epsilon = \sqrt{m_e^2 + p^2} \approx p$ であるから, 以下では $m_e = 0$ とする。電子の散乱角を θ とする。$\boldsymbol{p}_1\cdot\boldsymbol{p}_2 = p_1 p_2 \cos\theta$ である。

$$q_\mu^2 = (p_1 - p_2)^2 - (\boldsymbol{p}_1 - \boldsymbol{p}_2)^2 = -2p_1p_2\,(1-\cos\theta) = -4p_1p_2\sin^2(\theta/2) \le 0 \tag{4.13}$$

$$4Q_0^2 - q^2 = (p_1 + p_2)^2 - (\boldsymbol{p}_1 - \boldsymbol{p}_2)^2 = 2p_1p_2\,(1+\cos\theta) = 4p_1p_2\cos^2(\theta/2) \tag{4.14}$$

$4Q_\mu^2 + q_\mu^2 = (p_1+p_2)_\mu^2 + (p_1-p_2)_\mu^2 = 4m_e^2 = 0$ より $Q^2 = Q_0^2 + q_\mu^2/4$ になるから

$$V_{\rm T} = Q_0^2 + \frac{q_\mu^2}{4} - \frac{(Q_0q_0)^2}{q^2} - \frac{q_\mu^2}{2} = -\frac{q_\mu^2}{4q^2}\Big(4Q_0^2 - q^2\Big) - \frac{q_\mu^2}{2} = \frac{4Q_0^2 - q^2}{2}\left(\frac{-\,q_\mu^2}{2q^2} + \tan^2\frac{\theta}{2}\right)$$

したがって

$$\frac{d^2\sigma}{d\epsilon_2\, d\Omega} = \sigma_{\rm M}\left[\left(\frac{q_\mu^2}{q^2}\right)^2 R_{\rm L}(q_0,q) + \left(\frac{-\,q_\mu^2}{2q^2} + \tan^2\frac{\theta}{2}\right) R_{\rm T}(q_0,q)\right]$$

ただし

$$\sigma_{\rm M} = \frac{2\alpha^2}{q_\mu^4}\frac{p_2}{p_1}\frac{4Q_0^2 - q^2}{2} = \left(\frac{\alpha\cos(\theta/2)}{2\epsilon_1\sin^2(\theta/2)}\right)^2$$

である。

微分断面積から 2 つの応答関数を実験的に取り出すには, 次のようにする。入射電子のエネルギー $|\boldsymbol{p}_1|$ を変化させて微分断面積を求めるとき

$$q_0 = p_1 - p_2\,, \qquad q^2 = p_1^2 + p_2^2 - 2p_1p_2\cos\theta$$

が一定になる $p_2\,,\,\theta$ の散乱電子を測定する。このとき, 様々な θ に対して

$$\frac{1}{\sigma_{\rm M}}\frac{d^2\sigma}{d\epsilon_2\, d\Omega} = \left[\left(\frac{q_\mu^2}{q^2}\right)^2 R_{\rm L}(q_0,q) + \frac{-\,q_\mu^2}{2q^2} R_{\rm T}(q_0,q)\right] + R_{\rm T}(q_0,q)\,\tan^2\frac{\theta}{2} \tag{4.15}$$

を $\tan^2(\theta/2)$ の関数としてプロットすると直線になる (Rosenbluth plot)。この直線の傾きから $R_{\rm T}(q_0,q)$ が実験的に求まる。また, 縦軸との交点から $R_{\rm L}(q_0,q)$ も決定できる。

原子核の終状態を基底状態に限定した弾性散乱の場合

$$R_{\rm L}(q_0,q) = \Big|\langle 0|J_0(\boldsymbol{q})|0\rangle\Big|^2 \delta(q_0)\,, \quad R_{\rm T}(q_0,q) = \Big|\langle 0|\boldsymbol{J}_{\rm T}(\boldsymbol{q})|0\rangle\Big|^2 \delta(q_0) \tag{4.16}$$

$\boldsymbol{J}_{\mathrm{T}}$ はパリティを変えるから $R_{\mathrm{T}}=0$ である。これから

$$\frac{1}{\sigma_{\mathrm{M}}}\frac{d^2\sigma}{d\epsilon_2\,d\Omega}=\Big|\langle 0|J_0(\boldsymbol{q})|0\rangle\Big|^2\delta(q_0) \tag{4.17}$$

になり，原子核の電荷分布 $\langle 0|J_0(\boldsymbol{x})|0\rangle$ のフーリエ変換が得られる。点電荷の場合 $\langle 0|J_0(\boldsymbol{x})|0\rangle=\delta(\boldsymbol{x})$ であるから $\langle 0|J_0(\boldsymbol{q})|0\rangle=1$ になる。σ_{M} は点電荷による微分断面積 (モット断面積) である。

4.4 核子の電磁的形状因子

電子–核子散乱を考える。電子の場合, 電磁カレントの行列要素は (4.3) より

$$\langle\boldsymbol{p}_2\sigma_2|j^\mu(x)|\boldsymbol{p}_1\sigma_1\rangle_{\mathrm{el}}=\frac{1}{(2\pi)^3}\frac{m_e}{\sqrt{\epsilon_1\epsilon_2}}\overline{u}(\boldsymbol{p}_2,\sigma_2)\gamma^\mu u(\boldsymbol{p}_1,\sigma_1)\,e^{i(p_2-p_1)\cdot x}$$

である。核子は点状の電子とは異なり電磁的な広がりを持つから, 行列要素は上式のようにはならない。核子の電磁カレントの行列要素 $\langle\boldsymbol{k}_2\sigma_2|J^\mu(x)|\boldsymbol{k}_1\sigma_1\rangle$ は k_1^μ, k_2^μ の関数で 4 元ベクトルであるから, 最も一般的には

$$\langle\boldsymbol{k}_2\sigma_2|J^\mu(x)|\boldsymbol{k}_1\sigma_1\rangle=\frac{1}{(2\pi)^3}\frac{M}{\sqrt{E_1E_2}}\overline{u}(\boldsymbol{k}_2,\sigma_2)\Gamma^\mu(k_1,k_2)\,u(\boldsymbol{k}_1,\sigma_1)\,e^{iq\cdot x}$$

ただし

$$\Gamma^\mu(k_1,k_2)=k_1^\mu f_1(q_\mu^2)+k_2^\mu f_2(q_\mu^2)+\gamma^\mu f_3(q_\mu^2)\,,\qquad q^\mu=(k_2-k_1)^\mu$$

とおける。ここで u は核子のスピノール, $k^0=E=\sqrt{M^2+\boldsymbol{k}^2}$ である。k_1, k_2 に依存するスカラー量は q_μ^2 以外にも k_μ^2, $k_1\!\cdot\!k_2$ があるが, $k_\mu^2=M^2=$ 定数, $k_1\!\cdot\!k_2=M^2-q_\mu^2/2$ であるから f_k は q_μ^2 の関数である。カレント保存則より

$$\begin{aligned}\partial_\mu\langle\boldsymbol{k}_2\sigma_2|J^\mu(x)|\boldsymbol{k}_1\sigma_1\rangle&=\frac{1}{(2\pi)^3}\frac{M}{\sqrt{E_1E_2}}\overline{u}(\boldsymbol{k}_2,\sigma_2)\,q\!\cdot\!\Gamma\,u(\boldsymbol{k}_1,\sigma_1)\,e^{iq\cdot x}\\&=\frac{1}{(2\pi)^3}\frac{M}{\sqrt{E_1E_2}}\overline{u}(\boldsymbol{k}_2,\sigma_2)\Big(q\!\cdot\!k_1f_1+q\!\cdot\!k_2f_2\Big)u(\boldsymbol{k}_1,\sigma_1)\,e^{iq\cdot x}=0\end{aligned}$$

でなければならないから

$$q\!\cdot\!k_1f_1+q\!\cdot\!k_2f_2=\big(k_1\!\cdot\!k_2-M^2\big)\,(f_1-f_2)=0$$

したがって $f_1=f_2$ である。Gordon 分解

$$2M\,\overline{u}(\boldsymbol{k}_2,\sigma_2)\gamma^\mu u(\boldsymbol{k}_1,\sigma_1)=\overline{u}(\boldsymbol{k}_2,\sigma_2)\Big((k_1+k_2)^\mu+i\sigma^{\mu\nu}(k_2-k_1)_\nu\Big)u(\boldsymbol{k}_1,\sigma_1)$$

を使うと

$$\begin{aligned}\overline{u}(\boldsymbol{k}_2,\sigma_2)\Gamma^\mu(k_1,k_2)\,u(\boldsymbol{k}_1,\sigma_1)&=\overline{u}(\boldsymbol{k}_2,\sigma_2)\Big((k_1+k_2)^\mu\,f_1+\gamma^\mu f_3\Big)u(\boldsymbol{k}_1,\sigma_1)\\&=\overline{u}(\boldsymbol{k}_2,\sigma_2)\Big((2Mf_1+f_3)\,\gamma^\mu-if_1\sigma^{\mu\nu}q_\nu\Big)u(\boldsymbol{k}_1,\sigma_1)\end{aligned}$$

と表せる。$F_1=2Mf_1+f_3$, $F_2=-\,2Mf_1$ と置き直すと

$$\langle\boldsymbol{k}_2\sigma_2|J^\mu(x)|\boldsymbol{k}_1\sigma_1\rangle=\frac{1}{(2\pi)^3}\frac{M}{\sqrt{E_1E_2}}\overline{u}(\boldsymbol{k}_2,\sigma_2)\Gamma^\mu u(\boldsymbol{k}_1,\sigma_1)\,e^{iq\cdot x} \tag{4.18}$$

ただし

$$\Gamma^\mu=F_1(q_\mu^2)\gamma^\mu+\frac{F_2(q_\mu^2)}{2M}\,i\,\sigma^{\mu\nu}q_\nu\,,\qquad q^\mu=(k_2-k_1)^\mu \tag{4.19}$$

になる。自由粒子の場合, これは

$$\Gamma'^{\mu} = (F_1 + F_2)\,\gamma^{\mu} - \frac{F_2}{2M}(k_1 + k_2)^{\mu} \tag{4.20}$$

と同等であるが, 自由粒子でない場合は Γ^{μ} と Γ'^{μ} は同じ結果にはならない。

まず

$$eF_1(0) = \text{核子の電荷}\,, \qquad \frac{e}{2M}\Big(F_1(0) + F_2(0)\Big) = \text{核子の磁気能率}$$

を示す。(4.20) より

$$\langle \boldsymbol{k}_2\sigma_2|J^{\mu}(x)|\boldsymbol{k}_1\sigma_1\rangle = \frac{e^{iq\cdot x}}{(2\pi)^3}\frac{M}{\sqrt{E_1E_2}}\overline{u}(\boldsymbol{k}_2,\sigma_2)\left((F_1 + F_2)\,\gamma^{\mu} - \frac{F_2}{2M}(k_1 + k_2)^{\mu}\right)u(\boldsymbol{k}_1,\sigma_1)$$

Briet 座標系 ($\boldsymbol{k}_2 = -\,\boldsymbol{k}_1 = \boldsymbol{q}/2$) では

$$E_1 = E_2 = E_q = \sqrt{M^2 + q^2/4}\,, \qquad q_0 = E_2 - E_1 = 0$$

である。自由スピノールの具体形

$$u(\boldsymbol{k},\sigma) = \sqrt{\frac{E_k + M}{2M}}\begin{pmatrix} 1 \\ \dfrac{\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{k}}{E_k + M}\end{pmatrix}\chi_{\sigma}$$

を使うと

$$\overline{u}(\boldsymbol{k}_2,\sigma_2)u(\boldsymbol{k}_1,\sigma_1) = \frac{E_q}{M}\,\chi_2^{\dagger}\chi_1\,, \qquad \overline{u}(\boldsymbol{k}_2,\sigma_2)\gamma^{\mu}u(\boldsymbol{k}_1,\sigma_1) = \begin{cases} \chi_2^{\dagger}\chi_1\,, & \mu = 0 \\ \chi_2^{\dagger}\dfrac{i\,(\boldsymbol{\sigma}\times\boldsymbol{q})^i}{2M}\chi_1\,, & \mu = i \end{cases}$$

になるから

$$\langle \boldsymbol{k}_2\sigma_2|J^0(x)|\boldsymbol{k}_1\sigma_1\rangle = \frac{e^{-i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{x}}}{(2\pi)^3}\frac{M}{E_q}G_E(q_{\mu}^2)\,\chi_2^{\dagger}\chi_1$$

$$\langle \boldsymbol{k}_2\sigma_2|\boldsymbol{J}(x)|\boldsymbol{k}_1\sigma_1\rangle = \frac{e^{-i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{x}}}{(2\pi)^3}\frac{M}{E_q}G_M(q_{\mu}^2)\,\chi_2^{\dagger}\frac{i\,\boldsymbol{\sigma}\times\boldsymbol{q}}{2M}\chi_1$$

ただし

$$G_E(q_{\mu}^2) = F_1(q_{\mu}^2) + \frac{q_{\mu}^2}{4M^2}F_2(q_{\mu}^2)\,, \qquad G_M(q_{\mu}^2) = F_1(q_{\mu}^2) + F_2(q_{\mu}^2) \tag{4.21}$$

ここでは $q_0 = 0$ であるから $q_{\mu}^2 = -\,q^2$ である。核子の電荷を Q, 磁気能率を $\boldsymbol{\mu}$ とすると

$$Q = \int d^3x\,\langle \boldsymbol{k}_2\sigma_1|J^0(x)|\boldsymbol{k}_1\sigma_1\rangle = eG_E(0)\,\delta(\boldsymbol{q} = 0) = eG_E(0)\,\frac{V}{(2\pi)^3}$$

$$\boldsymbol{\mu} = \frac{e}{2}\int d^3x\,\boldsymbol{x}\times\langle \boldsymbol{k}_2\sigma_1|\boldsymbol{J}(x)|\boldsymbol{k}_1\sigma_1\rangle = \frac{e}{4E_q}G_M(q_{\mu}^2)\,\chi_2^{\dagger}\int\frac{d^3x}{(2\pi)^3}\,\boldsymbol{x}\times(\boldsymbol{\sigma}\times(-\boldsymbol{\nabla}))\,e^{-i\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{q}}\chi_1$$

部分積分すると

$$\boldsymbol{\mu} = \frac{e}{2E_q}G_M(q_{\mu}^2)\chi_2^{\dagger}\boldsymbol{\sigma}\chi_1\,\delta(\boldsymbol{q} = 0) = \frac{e}{2M}G_M(0)\chi_2^{\dagger}\boldsymbol{\sigma}\chi_1\,\frac{V}{(2\pi)^3}$$

したがって

$$eG_E(0) = eF_1(0) = \text{核子の電荷}\,, \quad \text{つまり} \quad F_1(0) = \begin{cases} 1\,, & \text{陽子} \\ 0\,, & \text{中性子}\end{cases}$$

$$\mu_{\mathrm{B}} = \frac{e}{2M}G_M(0) = \text{核子の磁気能率}$$

実験的には

$$\mu_{\rm B}=\frac{e}{2M}\times\begin{cases}\ \ 2.793\,, & 陽子\\ -1.913\,, & 中性子\end{cases}\ ,\quad したがって\quad F_2(0)=\kappa\,,\quad \kappa=\begin{cases}\ \ 1.793\,, & 陽子\\ -1.913\,, & 中性子\end{cases}$$

である。κ を異常磁気能率という。電子の場合は $\mu_{\rm B}=-e/(2m_e)$, $\kappa=0$ である。

微分断面積を求める。(4.18) から

$$\begin{aligned}\langle \boldsymbol{k}_2\sigma_2|J^\mu(\boldsymbol{q})|\boldsymbol{k}_1\sigma_1\rangle &= \int d^3x\,\exp{(i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{x})}\,\langle \boldsymbol{k}_2\sigma_2|J^\mu(x_0=0,\boldsymbol{x})|\boldsymbol{k}_1\sigma_1\rangle\\ &=\frac{M}{\sqrt{E_1E_2}}\overline{u}(\boldsymbol{k}_2,\sigma_2)\varGamma^\mu u(\boldsymbol{k}_1,\sigma_1)\,\delta(\boldsymbol{q}-\boldsymbol{k}_2+\boldsymbol{k}_1)\end{aligned}$$

$\boldsymbol{q}=\boldsymbol{p}_1-\boldsymbol{p}_2=\boldsymbol{k}_2-\boldsymbol{k}_1$ は運動量保存則である。電子–核子散乱の微分断面積は電子–原子核散乱の微分断面積 (4.7) において

$$K^\mu=\langle n|J^\mu(\boldsymbol{q})|0\rangle \longrightarrow \langle \boldsymbol{k}_2\sigma_2|J^\mu(\boldsymbol{q})|\boldsymbol{k}_1\sigma_1\rangle$$

の置き換えをすればよいから

$$\frac{d^2\sigma}{d\epsilon_2\,d\varOmega}=\frac{2\alpha^2}{q_\mu^4}\frac{p_2}{p_1}\left(\frac{q_\mu^2}{2}K\cdot K^*+2Q\cdot K\,Q\cdot K^*\right)\delta(E_2-E_1-q_0)\,\delta^2(\boldsymbol{q}-\boldsymbol{k}_2+\boldsymbol{k}_1) \tag{4.22}$$

ただし

$$K^\mu=\frac{M}{\sqrt{E_1E_2}}\overline{u}(\boldsymbol{k}_2,\sigma_2)\varGamma^\mu u(\boldsymbol{k}_1,\sigma_1)=\frac{M}{\sqrt{E_1E_2}}\overline{u}(\boldsymbol{k}_2,\sigma_2)\left(F_1\gamma^\mu+i\frac{F_2}{2M}\sigma^{\mu\nu}q_\nu\right)u(\boldsymbol{k}_1,\sigma_1)$$

核子の波動関数を体積 V で規格化し

$$\delta^2(\boldsymbol{q}-\boldsymbol{k}_2+\boldsymbol{k}_1)=\frac{V}{(2\pi)^3}\,\delta(\boldsymbol{q}-\boldsymbol{k}_2+\boldsymbol{k}_1)$$

を使うと

$$\frac{d^2\sigma}{d\epsilon_2\,d\varOmega}=\frac{2\alpha^2}{q_\mu^4}\frac{p_2}{p_1}\left(\frac{q_\mu^2}{2}K\cdot K^*+2Q\cdot K\,Q\cdot K^*\right)\delta(E_2-E_1-q_0)\,\delta(\boldsymbol{q}-\boldsymbol{k}_2+\boldsymbol{k}_1)\,\frac{(2\pi)^3}{V}$$

更に, $\boldsymbol{k}_2$ 近傍の状態数は $Vd^3k_2/(2\pi)^3$ であるから $\boldsymbol{k}_2$ で積分すると

$$\frac{d^2\sigma}{d\epsilon_2\,d\varOmega}=\frac{2\alpha^2}{q_\mu^4}\frac{p_2}{p_1}\left(\frac{q_\mu^2}{2}K\cdot K^*+2Q\cdot K\,Q\cdot K^*\right)\delta(E_2-E_1-q_0)\,,\qquad \boldsymbol{k}_2=\boldsymbol{k}_1+\boldsymbol{q}$$

になる。初期状態の核子スピンについて平均をとり, 終状態のスピンについて足し合わせれば

$$\frac{d^2\sigma}{d\epsilon_2\,d\varOmega}=\frac{2\alpha^2}{q_\mu^4}\frac{p_2}{p_1}S\,\delta(E_2-E_1-q_0)\,,\qquad S=\frac{1}{2}\sum_{\sigma_1\sigma_2}\left(\frac{q_\mu^2}{2}K\cdot K^*+2Q\cdot K\,Q\cdot K^*\right) \tag{4.23}$$

(4.20) より ($\tilde{F} = F_1 + F_2$)

$$\sum_{\sigma_1\sigma_2} K\cdot K^* = \frac{M^2}{E_1E_2}\mathrm{Tr}\left[\left(\tilde{F}\gamma^\mu - \frac{F_2}{2M}(k_1+k_2)^\mu\right)\frac{\not{k}_1+M}{2M}\left(\tilde{F}\gamma_\mu - \frac{F_2}{2M}(k_1+k_2)_\mu\right)\frac{\not{k}_2+M}{2M}\right]$$

$$= \frac{1}{E_1E_2}\left(\left(4M^2-2k_1\cdot k_2\right)\tilde{F}^2 + (k_1+k_2)_\mu^2\left(M^2+k_1\cdot k_2\right)\left(\frac{F_2}{2M}\right)^2 - (k_1+k_2)_\mu^2\,\tilde{F}F_2\right) \tag{4.24}$$

$$\sum_{\sigma_1\sigma_2} Q\cdot K\, Q\cdot K^* = \frac{1}{E_1E_2}\left(\left(2Q\cdot k_1\, Q\cdot k_2 + Q_\mu^2\left(M^2-k_1\cdot k_2\right)\right)\tilde{F}^2 + \left(M^2+k_1\cdot k_2\right)\Big((k_1+k_2)\cdot Q\Big)^2\left(\frac{F_2}{2M}\right)^2 - \Big((k_1+k_2)\cdot Q\Big)^2\tilde{F}F_2\right) \tag{4.25}$$

$q^\mu = k_2^\mu - k_1^\mu$ であるから

$$2k_1\cdot k_2 = 2M^2 - q_\mu^2\,, \qquad (k_1+k_2)_\mu^2 = 4M^2 - q_\mu^2 \tag{4.26}$$

以下では, 実験室系, つまり, 初期状態で静止した核子の散乱を考える。この場合, $E_1 = M$, $\boldsymbol{k}_1 = 0$ であるから

$$Q\cdot k_1 = Q_0 M\,, \qquad Q\cdot k_2 = Q_0E_2 - \boldsymbol{Q}\cdot\boldsymbol{k}_2 = Q_0\left(M+q_0\right) - \boldsymbol{Q}\cdot\boldsymbol{q} = Q_0M + q\cdot Q = Q_0M$$

これから

$$\sum_{\sigma_1\sigma_2} K\cdot K^* = \frac{1}{E_1E_2}\left(\left(2M^2+q_\mu^2\right)\tilde{F}^2 + \frac{4M^2-q_\mu^2}{2}\left[\left(1-\frac{q_\mu^2}{4M^2}\right)F_2^2 - 2\tilde{F}F_2\right]\right)$$

$$\sum_{\sigma_1\sigma_2} Q\cdot K\, Q\cdot K^* = \frac{1}{E_1E_2}\left(\left(2M^2Q_0^2 + \frac{1}{2}q_\mu^2Q_\mu^2\right)\tilde{F}^2 + 2M^2Q_0^2\left[\left(1-\frac{q_\mu^2}{4M^2}\right)F_2^2 - 2\tilde{F}F_2\right]\right)$$

したがって

$$S = \frac{1}{2ME_2}\left(A\tilde{F}^2 + B\left[\left(1-\frac{q_\mu^2}{4M^2}\right)F_2^2 - 2\tilde{F}F_2\right]\right)$$

ただし

$$A = \frac{q_\mu^2}{2}\left(2M^2+q_\mu^2\right) + 4M^2Q_0^2 + q_\mu^2Q_\mu^2\,, \qquad B = M^2\left(4Q_0^2 - q^2\right) + M^2q_0^2 - \frac{q_\mu^4}{4}$$

である。$4Q_\mu^2 + q_\mu^2 = 4m_e^2 = 0$ より

$$A = M^2q_\mu^2 + 4M^2Q_0^2 + \frac{q_\mu^4}{4} = M^2\left(4Q_0^2 - q^2\right) + M^2q_0^2 + \frac{q_\mu^4}{4}$$

$\boldsymbol{k}_1 = 0$ の場合

$$2k_1\cdot k_2 = 2ME_2 = 2M^2 - q_\mu^2\,, \qquad \therefore \qquad q_0 = E_2 - M = -\frac{q_\mu^2}{2M} \tag{4.27}$$

になるから

$$A = M^2\left(4Q_0^2 - q^2\right) + \frac{q_\mu^4}{2}\,, \qquad B = M^2\left(4Q_0^2 - q^2\right)$$

したがって

$$S = \frac{M}{2E_2}\left(\frac{q_\mu^4}{2M^2}\tilde{F}^2 + \left(4Q_0^2 - q^2\right)\left(\tilde{F}^2 + \left(1 - \frac{q_\mu^2}{4M^2}\right)F_2^2 - 2\tilde{F}F_2\right)\right)$$
$$= \frac{M}{2E_2}\left(\frac{q_\mu^4}{2M^2}\Big(F_1 + F_2\Big)^2 + \left(4Q_0^2 - q^2\right)\left(F_1^2 - \frac{q_\mu^2}{4M^2}F_2^2\right)\right)$$

(4.13), (4.14) を代入すると

$$S = \frac{2Mp_1p_2}{E_2}\cos^2\frac{\theta}{2}\left(F_1^2 - \frac{q_\mu^2}{4M^2}F_2^2 - \frac{q_\mu^2}{2M^2}\Big(F_1 + F_2\Big)^2\tan^2\frac{\theta}{2}\right)$$

(4.21) で定義した G_E, G_M を用いると

$$F_1 = \frac{G_E - G_M\, q_\mu^2/4M^2}{1 - q_\mu^2/4M^2}\,, \qquad F_2 = \frac{G_M - G_E}{1 - q_\mu^2/4M^2}$$

であるから

$$S = \frac{2Mp_1p_2}{E_2}\cos^2\frac{\theta}{2}\left(\frac{G_E^2 - G_M^2\, q_\mu^2/4M^2}{1 - q_\mu^2/4M^2} - \frac{q_\mu^2}{2M^2}G_M^2\tan^2\frac{\theta}{2}\right)$$

$q_0 = -\, q_\mu^2/2M$ を使うと

$$\frac{1}{1 - q_\mu^2/4M^2} = \frac{q_\mu^2}{q_\mu^2 - (q_\mu^2/2M)^2} = \frac{-\, q_\mu^2}{q^2}$$

であるから

$$\frac{d^2\sigma}{d\epsilon_2\, d\Omega} = \frac{2\alpha^2}{q_\mu^4}\frac{p_2}{p_1}\,S\,\delta(E_2 - M - q_0) = \sigma_{\rm M}\frac{M}{E_2}\left[\left(\frac{q_\mu^2}{q^2}\right)^2 R_{\rm L} + \frac{-\, q_\mu^2}{2q^2}R_{\rm T} + R_{\rm T}\tan^2\frac{\theta}{2}\right] \tag{4.28}$$

ただし

$$R_{\rm L}(q_\mu) = \frac{q^2}{-\, q_\mu^2}G_E^2\,\delta(E_2 - M - q_0)\,, \qquad R_{\rm T}(q_\mu) = \frac{-\, q_\mu^2}{2M^2}G_M^2\,\delta(E_2 - M - q_0)$$

である。M/E_2 を除けば (4.28) は (4.15) と同じである。(4.15) では原子核は非常に重いとして recoil を無視している。$M \gg q$ であるとして $M/E_2 = M/\sqrt{M^2 + q^2} \approx 1$ とすれば (4.15) になる。

Rosenbluth plot を行えば実験的に G_E^2, G_M^2 を求めることができる。実験によれば (例えば, K. W. Chen et al., Phys. Rev **141** (1966) 1267, 1286, 1298)

$$陽子\ :\ G_E \approx \frac{G_M}{1 + \kappa_{\rm p}} \approx G\,, \qquad 中性子\ :\ G_E \approx \frac{q_\mu^2}{4M^2}G_M\,, \quad \frac{G_M}{\kappa_{\rm n}} \approx G$$

ここで, $\kappa_{\rm p} = 1.793$, $\kappa_{\rm n} = -\, 1.913$ は陽子, 中性子の異常磁気能率である。また

$$G(q_\mu^2) = \frac{1}{\left(1 - q_\mu^2/\Lambda^2\right)^2}\,, \qquad \Lambda \approx 840\,{\rm MeV} \tag{4.29}$$

したがって

$$陽子\quad F_1(q_\mu^2) = \frac{1 - (1 + \kappa_{\rm p})q_\mu^2/4M^2}{1 - q_\mu^2/4M^2}\,G(q_\mu^2)\,, \quad F_2(q_\mu^2) = \frac{\kappa_{\rm p}G(q_\mu^2)}{1 - q_\mu^2/4M^2} \tag{4.30}$$

$$中性子\quad F_1(q_\mu^2) = 0\,, \quad F_2(q_\mu^2) = \kappa_{\rm n}G(q_\mu^2) \tag{4.31}$$

になる。

recoil を無視すれば $R_{\rm L} \approx G_E^2(-q^2)\,\delta(q_0)$ である。これと (4.16) を比較すれば, 陽子の電荷分布 $e\rho(x)$ は

$$G_E(-q^2) = \frac{1}{\left(1+q^2/\Lambda^2\right)^2} = \int d^3x\, e^{i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{x}}\rho(x)$$

指数関数を展開すれば

$$\int d^3x\, e^{i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{x}}\rho(x) = \int d^3x \left(1 + i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{x} - \frac{(\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{x})^2}{2} + \cdots\right)\rho(x) = 1 - \frac{q^2}{6}\int d^3x\, x^2\rho(x) + \cdots$$

これから

$$\langle\, x^2\,\rangle = \int d^3x\, x^2\rho(x) = -\,6\frac{d}{dq^2}\int d^3x\, e^{i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{x}}\rho(x)\bigg|_{q=0} = -\,\frac{d}{dq^2}\,\frac{6}{\left(1+q^2/\Lambda^2\right)^2}\Bigg|_{q=0} = \frac{12}{\Lambda^2}$$

$\Lambda \approx 840\,\mathrm{MeV}$ を代入し $\hbar$, c を元に戻すと $\sqrt{\langle\, x^2\,\rangle} = \sqrt{12}\,\hbar c/\Lambda \approx 0.81\,\mathrm{fm}$ になる。陽子は $1\,\mathrm{fm}$ 程度の広がりをもつ。中性子の場合

$$G_E(-q^2) = -\,\frac{\kappa_n q^2}{4M^2}\frac{1}{\left(1+q^2/\Lambda^2\right)^2} = -\frac{q^2}{6}\int d^3x\, x^2\rho(x) + \cdots\,, \qquad \int d^3x\,\rho(x) = 0$$

より

$$\langle\, x^2\,\rangle = \frac{3\kappa_n}{2M^2} = -\,\left(0.36\,\mathrm{fm}\right)^2$$

であり負になる。中性子の場合, $\rho(x)$ は正の部分と負の部分があるから $\langle\, x^2\,\rangle$ は負になりえる。中性子の G_E は $\langle\, x^2\rangle$, つまり $dG_E/dq^2\big|_{q=0}$ は実験的に定まっているが, これ以上の q^2 依存性は実験的には誤差が大きく明確には決まっていない。

(4.13) より

$$q_\mu^2 = -4p_1p_2\sin^2(\theta/2) = -4p_1(p_1-q_0)\sin^2(\theta/2) = -4p_1\left(p_1 + \frac{q_\mu^2}{2M}\right)\sin^2(\theta/2)$$

であるから

$$q_\mu^2 = -\,\frac{4p_1^2\sin^2(\theta/2)}{1+(2p_1/M)\sin^2(\theta/2)} \tag{4.32}$$

と表せる。

$$\begin{aligned} E_2 - E_1 - q_0 &= \sqrt{M^2 + (\boldsymbol{p}_1-\boldsymbol{p}_2)^2} - M - p_1 + p_2 \\ &= \sqrt{M^2 + p_1^2 + p_2^2 - 2p_1p_2\cos\theta} - M - p_1 + p_2 = f(p_2) \end{aligned}$$

とすると $f(p_2)=0$ の点では

$$\frac{df(p_2)}{dp_2} = \frac{p_2 - p_1\cos\theta}{\sqrt{M^2+p_1^2+p_2^2-2p_1p_2\cos\theta}} + 1 = \frac{M + p_1(1-\cos\theta)}{M+p_1-p_2} = \frac{M+2p_1\sin^2(\theta/2)}{E_2}$$

である。(4.28) を $\epsilon_2 = p_2$ で積分する場合, $\delta(E_2-E_1-q_0) = \delta(f(p_2))$ より $(df/dp_2)^{-1}$ がかかるから

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{\sigma_{\rm M}}{1+(2p_1/M)\sin^2(\theta/2)}\left(F_1^2 - \frac{q_\mu^2}{4M^2}F_2^2 - \frac{q_\mu^2}{2M^2}\Big(F_1+F_2\Big)^2\tan^2\frac{\theta}{2}\right) \tag{4.33}$$

になる。これは Bjorken & Drell の (10.90) である。(4.27), (4.32) よりエネルギー移行は

$$q_0 = p_1 - p_2 = p_1\frac{(2p_1/M)\sin^2(\theta/2)}{1+(2p_1/M)\sin^2(\theta/2)} \tag{4.34}$$

である。

4.5 重心系での微分断面積

重心系で (4.23) を適用して重心系での微分断面積を求める。これとは独立に, 実験室系の微分断面積 (4.33) をローレンツ変換して求める。

(4.23) を適用
散乱前後での電子の運動量は p_1^μ, p_2^μ, 散乱前後での核子の運動量は k_1^μ, k_2^μ である。

$$\epsilon_i = p_i^0 = \sqrt{m_e^2 + p_i^2}\,, \qquad E_i = k_i^0 = \sqrt{M^2 + k_i^2}\,, \qquad \text{ただし} \quad p_i = |\boldsymbol{p}_i|\,, \quad k_i = |\boldsymbol{k}_i|$$

である。重心系では $\boldsymbol{p}_1 + \boldsymbol{k}_1 = \boldsymbol{p}_2 + \boldsymbol{k}_2 = \boldsymbol{0}$ より $k_1 = p_1$, $k_2 = p_2$ である。エネルギー保存は

$$\delta\big(E_2 + \epsilon_2 - E_1 - \epsilon_1\big) = \left(\frac{\partial}{\partial\epsilon_1}\big(E_1 + \epsilon_1\big)\right)^{-1} \delta(\epsilon_2 - \epsilon_1) = \frac{E_1}{\epsilon_1 + E_1}\delta(\epsilon_2 - \epsilon_1)$$

これから $p_1 = p_2 = k_1 = k_2$ になる。実験室系では (4.34) より $q_0 \neq 0$ であるが, 重心系では $q_0 = 0$ であり反跳はない。

(4.23) は標的が静止している場合である。(4.4) より $d^2\sigma/d\epsilon_2 d\Omega$ は入射粒子の速度 $v_1 = |\boldsymbol{v}_1|$ に逆比例する。標的が速度 $\boldsymbol{u}_1$ で移動する場合, $\boldsymbol{v}_1$ を相対速度 $|\boldsymbol{v}_1 - \boldsymbol{u}_1|$ に置き換え

$$\frac{d^2\sigma}{d\epsilon_2\, d\Omega} = \frac{v_1}{|\boldsymbol{v}_1 - \boldsymbol{u}_1|} \times (4.23)$$

である。

$$\boldsymbol{v}_1 = \frac{\boldsymbol{p}_1}{\epsilon_1}\,, \quad \boldsymbol{u}_1 = \frac{\boldsymbol{k}_1}{k_1^0} = -\frac{\boldsymbol{p}_1}{E_1} \qquad \therefore \qquad \frac{v_1}{|\boldsymbol{v}_1 - \boldsymbol{u}_1|} = \frac{E_1}{\epsilon_1 + E_1}$$

になり

$$\frac{d^2\sigma}{d\epsilon_2\, d\Omega} = \frac{E_1}{p_1 + E_1}\frac{2\alpha^2}{q_\mu^4}\frac{p_2}{p_1}\, S\, \delta(E_2 + \epsilon_2 - E_1 - \epsilon_1) = \frac{2\alpha^2}{q_\mu^4}\left(\frac{E_1}{\epsilon_1 + E_1}\right)^2 S\, \delta(\epsilon_2 - \epsilon_1)$$

ϵ_2 で積分すると

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{2\alpha^2}{q_\mu^4}\left(\frac{E_1}{\epsilon_1 + E_1}\right)^2 S\,, \qquad S = \frac{q_\mu^2}{4}S_1 + S_2 \tag{4.35}$$

ただし S_1 は (4.24), S_2 は (4.25) である ($E_2 = E_1 = \sqrt{M^2 + p_1^2}$)。

以下では $m_e = 0$ とする。$\epsilon_1 = p_1$ になる。

$$q_\mu^2 = \big(p_1 - p_2\big)_\mu^2 = 2m_e^2 - 2p_1\!\cdot\! p_2 = -2p_1^2 + 2\boldsymbol{p}_1\!\cdot\!\boldsymbol{p}_2 \tag{4.36}$$

$$Q_k \equiv Q\!\cdot\! k_i = \frac{p_1^0 + p_2^0}{2}k_i^0 - \frac{\boldsymbol{p}_1 + \boldsymbol{p}_2}{2}\!\cdot\!\boldsymbol{k}_i = p_1 E_1 + \frac{\boldsymbol{p}_1 + \boldsymbol{p}_2}{2}\!\cdot\!\boldsymbol{p}_i = p_1\big(p_1 + E_1\big) + \frac{q_\mu^2}{4} \tag{4.37}$$

であり $q^\mu = k_2^\mu - k_1^\mu$ より

$$2k_1\!\cdot\! k_2 = 2M^2 - q_\mu^2\,, \qquad (k_1 + k_2)_\mu^2 = 4M^2 - q_\mu^2$$

になる。また, $4Q_\mu^2 + q_\mu^2 = 4m_e^2 = 0$ であるから

$$E_1^2 S_1 = \big(2M^2 + q_\mu^2\big)\,\tilde{F}^2 + \frac{4M^2 - q_\mu^2}{2}\left[\left(1 - \frac{q_\mu^2}{4M^2}\right)F_2^2 - 2\tilde{F}F_2\right]$$

$$E_1^2 S_2 = \left(2Q_k^2 - \frac{q_\mu^4}{8}\right)\tilde{F}^2 + 2Q_k^2\left[\left(1 - \frac{q_\mu^2}{4M^2}\right)F_2^2 - 2\tilde{F}F_2\right]$$

したがって

$$E_1^2 S = 2\left(Q_k^2 + \frac{M^2 q_\mu^2}{4} + \frac{q_\mu^4}{16}\right)\tilde{F}^2 + 2\left(Q_k^2 + \frac{M^2 q_\mu^2}{4} - \frac{q_\mu^4}{16}\right)\left[\left(1 - \frac{q_\mu^2}{4M^2}\right)F_2^2 - 2\tilde{F}F_2\right]$$

である。(4.37) 及び $2p_1(p_1+E_1)+M^2=(p_1+E_1)^2$ より

$$Q_k^2 + \frac{M^2 q_\mu^2}{4} = \big(p_1+E_1\big)^2\left(p_1^2 + \frac{q_\mu^2}{4}\right) + \frac{q_\mu^4}{16}$$

になるから

$$\begin{aligned}\left(\frac{E_1}{p_1+E_1}\right)^2 S &= 2\left(p_1^2+\frac{q_\mu^2}{4}\right)\left(\tilde{F}^2 + \left(1-\frac{q_\mu^2}{4M^2}\right)F_2^2 - 2\tilde{F}F_2\right) + \frac{q_\mu^4}{4\big(p_1+E_1\big)^2}\tilde{F}^2 \\ &= 2\left(p_1^2+\frac{q_\mu^2}{4}\right)\left(F_1^2 - \frac{q_\mu^2}{4M^2}F_2^2\right) + \frac{q_\mu^4}{4\big(p_1+E_1\big)^2}\big(F_1+F_2\big)^2\end{aligned}$$

これと

$$q_\mu^2 = -\,4p_1^2\sin^2(\theta/2)\,, \qquad p_1^2 + q_\mu^2/4 = p_1^2\cos^2(\theta/2) \tag{4.38}$$

より (4.35) は

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \sigma_{\mathrm{M}}\left(F_1^2 - \frac{q_\mu^2}{4M^2}F_2^2 - \frac{q_\mu^2}{2(p_1+E_1)^2}\big(F_1+F_2\big)^2\tan^2(\theta/2)\right), \quad \sigma_{\mathrm{M}} = \frac{\alpha^2\cos^2(\theta/2)}{4p_1^2\sin^4(\theta/2)} \tag{4.39}$$

p_1, θ は重心系での値である。(4.33) の $1+(2p_1/M)\sin^2(\theta/2)$ に対応する項はない。

ローレンツ変換

散乱後の電子の運動量を実験室系で p^μ, 重心系で p_{cm}^μ とする。実験室系から見て, 重心系が z 軸方向に速さ v で移動するとき, ローレンツ変換より

$$p^1 = p_{\mathrm{cm}}^1\,, \quad p^2 = p_{\mathrm{cm}}^2\,, \quad p^3 = \frac{p_{\mathrm{cm}}^3 + v p_{\mathrm{cm}}^0}{\sqrt{1-v^2}}\,, \quad p_{\mathrm{cm}}^0 = \sqrt{m_e^2 + \boldsymbol{p}_{\mathrm{cm}}^2} \tag{4.40}$$

である。$\boldsymbol{p}\,, \boldsymbol{p}_{\mathrm{cm}}$ の極座標を $(\theta,\,\phi)\,,\,(\theta_{\mathrm{cm}},\,\phi_{\mathrm{cm}})$ で表す。ただし $\phi_{\mathrm{cm}}=\phi$ である。(4.40) は

$$|\boldsymbol{p}|\sin\theta = |\boldsymbol{p}_{\mathrm{cm}}|\sin\theta_{\mathrm{cm}}\,, \qquad |\boldsymbol{p}|\cos\theta = \frac{|\boldsymbol{p}_{\mathrm{cm}}|}{\sqrt{1-v^2}}\Big(\cos\theta_{\mathrm{cm}} + u\Big)\,, \qquad u = v\frac{\sqrt{m_e^2+\boldsymbol{p}_{\mathrm{cm}}^2}}{|\boldsymbol{p}_{\mathrm{cm}}|}$$

になる。

$$\boldsymbol{p}^2 = \boldsymbol{p}_{\mathrm{cm}}^2 F^2(\theta_{\mathrm{cm}})\,, \qquad F(\theta_{\mathrm{cm}}) = \sqrt{\sin^2\theta_{\mathrm{cm}} + \frac{\big(\cos\theta_{\mathrm{cm}}+u\big)^2}{1-v^2}}$$

より

$$\sin\theta = \frac{\sin\theta_{\mathrm{cm}}}{F(\theta_{\mathrm{cm}})}\,, \qquad \cos\theta = \frac{\cos\theta_{\mathrm{cm}}+u}{\sqrt{1-v^2}\,F(\theta_{\mathrm{cm}})} \tag{4.41}$$

になる。

実験室系では, 静止した核子に z 軸方向の運動量 p の電子が衝突する。電子 $p^\mu=(p^0,0,0,p)$, 核子 $k^\mu=(M,0,0,0)$ である。重心系では $p_{\mathrm{cm}}^\mu=(p_{\mathrm{cm}}^0,0,0,p_{\mathrm{cm}})$, $k_{\mathrm{cm}}^\mu=(k_{\mathrm{cm}}^0,0,0,k_{\mathrm{cm}})$ とする。重心の速さを v とすると, ローレンツ変換より

$$p_{\mathrm{cm}} = \frac{p - vp^0}{\sqrt{1-v^2}}\,, \qquad k_{\mathrm{cm}} = \frac{-vM}{\sqrt{1-v^2}}\,, \qquad k_{\mathrm{cm}}^0 = \frac{M}{\sqrt{1-v^2}}$$

である。重心系は $p_{\rm cm}+k_{\rm cm}=0$ で定義されるから

$$v=\frac{p}{p^0+M}\,,\qquad p_{\rm cm}=-k_{\rm cm}=\frac{Mp}{\sqrt{\big(p^0+M\big)^2-p^2}} \tag{4.42}$$

になる。重心系での電子, 核子のエネルギーを

$$\epsilon_{\rm cm}=p^0_{\rm cm}=\sqrt{m_e^2+p_{\rm cm}^2}\,,\qquad E_{\rm cm}=k^0_{\rm cm}=\sqrt{M^2+p_{\rm cm}^2}$$

で表す。$E_{\rm cm}=M/\sqrt{1-v^2}$ より

$$v=\frac{p_{\rm cm}}{E_{\rm cm}}\,,\qquad u=v\frac{\epsilon_{\rm cm}}{p_{\rm cm}}=\frac{\epsilon_{\rm cm}}{E_{\rm cm}} \tag{4.43}$$

である。実験室系での微分断面積を $d\sigma/d\Omega$, 重心系での微分断面積を $d\sigma/d\Omega_{\rm cm}$ とする。同じ領域の散乱粒子数は座標系に依存しないから

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}d\Omega=\frac{d\sigma}{d\Omega_{\rm cm}}d\Omega_{\rm cm}\,,\qquad d\Omega=d\theta\sin\theta d\phi\,,\qquad d\Omega_{\rm cm}=d\theta_{\rm cm}\sin\theta_{\rm cm}d\phi$$

(4.41) より

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}=\frac{d\sigma}{d\Omega_{\rm cm}}\frac{d\cos\theta_{\rm cm}}{d\cos\theta}=\frac{d\sigma}{d\Omega_{\rm cm}}\frac{\sqrt{1-v^2}\,F^3(\theta_{\rm cm})}{1+u\cos\theta_{\rm cm}} \tag{4.44}$$

である。これと (4.41) に $v=p_{\rm cm}/E_{\rm cm}$ を代入すると

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}=\frac{d\sigma}{d\Omega_{\rm cm}}\frac{\Big(M^2+m_e^2+p_{\rm cm}^2\big(1+\cos^2\theta_{\rm cm}\big)+2E_{\rm cm}\epsilon_{\rm cm}\cos\theta_{\rm cm}\Big)^{3/2}}{M^2\big(E_{\rm cm}+\epsilon_{\rm cm}\cos\theta_{\rm cm}\big)}$$

$$\tan\theta=\frac{M\sin\theta_{\rm cm}}{\epsilon_{\rm cm}+E_{\rm cm}\cos\theta_{\rm cm}}$$

これは R. G. Newton, Scattering Theory of Waves and Particles (Dover Pub.) の (5.27b), (5.29c) である。

以下では $m_e=0$ とする。$u=v$ より $F(\theta_{\rm cm})=\dfrac{1+v\cos\theta_{\rm cm}}{\sqrt{1-v^2}}$ になる。(4.41) は

$$\cos\theta=\frac{\cos\theta_{\rm cm}+v}{1+v\cos\theta_{\rm cm}}\,,\qquad\therefore\qquad\begin{cases}\cos^2(\theta/2)=\dfrac{1+\cos\theta}{2}=\dfrac{1+v}{1+v\cos\theta_{\rm cm}}\cos^2(\theta_{\rm cm}/2)\\[2ex]\sin^2(\theta/2)=\dfrac{1-\cos\theta}{2}=\dfrac{1-v}{1+v\cos\theta_{\rm cm}}\sin^2(\theta_{\rm cm}/2)\end{cases}$$

であり (4.44) は

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}=\frac{d\sigma}{d\Omega_{\rm cm}}\frac{\big(1+v\cos\theta_{\rm cm}\big)^2}{1-v^2} \tag{4.45}$$

になる。実験室系の微分断面積 (4.33)

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}=\sigma_0(\theta)\left(F_1^2(q_\mu^2)-\frac{q_\mu^2}{4M^2}F_2^2(q_\mu^2)-\frac{q_\mu^2}{2M^2}\Big(F_1+F_2\Big)^2\tan^2\frac{\theta}{2}\right)$$

$$\sigma_0(\theta)=\frac{1}{1+(2p/M)\sin^2(\theta/2)}\frac{\alpha^2\cos^2(\theta/2)}{4p^2\sin^4(\theta/2)}$$

を考える。$p^0=p$ であるから (4.42) より $p=Mv/(1-v)$ になり

$$1+(2p/M)\sin^2(\theta/2)=1+\frac{2v}{1-v}\frac{1-v}{1+v\cos\theta_{\rm cm}}\frac{1-\cos\theta_{\rm cm}}{2}=\frac{1+v}{1+v\cos\theta_{\rm cm}}$$

(4.45) より

$$\sigma_{0,\mathrm{cm}}(\theta_{\mathrm{cm}}) = \frac{1-v^2}{\big(1+v\cos\theta_{\mathrm{cm}}\big)^2}\sigma_0(\theta) = \frac{1-v}{1+v\cos\theta_{\mathrm{cm}}}\frac{\alpha^2\cos^2(\theta/2)}{4p^2\sin^4(\theta/2)} = \frac{1+v}{1-v}\frac{\alpha^2\cos^2(\theta_{\mathrm{cm}}/2)}{4p^2\sin^4(\theta_{\mathrm{cm}}/2)}$$

である。(4.43) より

$$\frac{1+v}{1-v}\frac{1}{p^2} = \frac{1+v}{1-v}\frac{(1-v)^2}{M^2v^2} = \frac{1-v^2}{M^2v^2} = \frac{1}{p_{\mathrm{cm}}^2}$$

になるから

$$\sigma_{0,\mathrm{cm}}(\theta_{\mathrm{cm}}) = \frac{\alpha^2\cos^2(\theta_{\mathrm{cm}}/2)}{4p_{\mathrm{cm}}^2\sin^4(\theta_{\mathrm{cm}}/2)} = (4.39) \text{ の } \sigma_{\mathrm{M}}$$

重心系では

$$\frac{d\sigma}{d\Omega_{\mathrm{cm}}} = \sigma_{0,\mathrm{cm}}(\theta_{\mathrm{cm}})\left(F_1^2(q_\mu^2) - \frac{q_\mu^2}{4M^2}F_2^2(q_\mu^2) - \frac{q_\mu^2}{2M^2}\Big(F_1+F_2\Big)^2\tan^2\frac{\theta}{2}\right) \tag{4.46}$$

になる。q_μ^2 はローレンツ・スカラーで実験室系でも重心系でも同じになる。実際

$$(4.32) \text{ の } q_\mu^2 = -\frac{4p^2\sin^2(\theta/2)}{1+(2p/M)\sin^2(\theta/2)} = -4p^2\frac{1-v}{1+v}\sin^2\frac{\theta_{\mathrm{cm}}}{2} = -4p_{\mathrm{cm}}^2\sin^2\frac{\theta_{\mathrm{cm}}}{2} = (4.38) \text{ の } q_\mu^2$$

である。

$$\tan^2\frac{\theta}{2} = \frac{1-v}{1+v}\tan^2\frac{\theta_{\mathrm{cm}}}{2} = \frac{M^2}{\big(E_{\mathrm{cm}}+p_{\mathrm{cm}}\big)^2}\tan^2\frac{\theta_{\mathrm{cm}}}{2}$$

(4.46) は (4.39) に一致する。

4.6　非相対論的フェルミガス

応答関数を最も簡単な原子核のモデルである非相対論的フェルミガスで求めてみる。相対論的フェルミガスでも解析的に求められるが, 多少複雑になるのでここでは非相対論的に扱う。

運動量 $\boldsymbol{p}$ の陽子が運動量 $\boldsymbol{q}$ の仮想光子を吸収した場合, 散乱後の陽子の運動量は $\boldsymbol{p}+\boldsymbol{q}$ になるから, 励起エネルギーは

$$q_0 = \frac{(\boldsymbol{p}+\boldsymbol{q})^2}{2M^*} - \frac{\boldsymbol{p}^2}{2M^*} = \frac{\boldsymbol{q}^2}{2M^*} + \frac{\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{q}}{M^*}, \qquad M^* = \text{核子の有効質量}$$

である。k_{p} を陽子のフェルミ波数 とすると $p < k_{\mathrm{p}}$ であるから

$$\frac{q^2}{2M^*} - \frac{k_{\mathrm{p}}q}{M^*} < q_0 < \frac{q^2}{2M^*} + \frac{k_{\mathrm{p}}q}{M^*}$$

になる。これから応答関数は $q_0 = q^2/(2M^*)$ を中心にして幅が $2k_{\mathrm{p}}q/M^*$ 程度のピークになることが予想される。

(4.12) の縦方向応答関数を求める。J_0 は電荷密度であるから, 非相対論の場合

$$J_0(\boldsymbol{x}) = \sum_{k=1}^{Z}\delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_k)$$

和は陽子について行う。第 2 量子化で J_0 を陽子の生成・消滅演算子 $a_{\boldsymbol{p}\sigma}^\dagger$, $a_{\boldsymbol{p}\sigma}$

$$a_{\boldsymbol{p}\sigma}^\dagger\, a_{\boldsymbol{p}'\sigma'} + a_{\boldsymbol{p}'\sigma'}\, a_{\boldsymbol{p}\sigma}^\dagger = \delta_{\sigma\sigma'}\delta(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}'), \qquad \text{その他は反交換}$$

で表す。ただし, 波動関数は $(2\pi)^{-3/2}\exp(i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x})\,\chi_\sigma$ である。

$$J_0(\boldsymbol{x}) = \int d^3p\,d^3p' \sum_{\sigma\sigma'} \langle \boldsymbol{p}'\sigma'|\delta(\boldsymbol{x}-\hat{\boldsymbol{x}})|\boldsymbol{p}\,\sigma\rangle\, a^\dagger_{\boldsymbol{p}'\sigma'} a_{\boldsymbol{p}\sigma}$$
$$= \frac{1}{(2\pi)^3}\int d^3p\,d^3p' \exp\left(i(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}')\cdot\boldsymbol{x}\right)\sum_\sigma a^\dagger_{\boldsymbol{p}'\sigma} a_{\boldsymbol{p}\sigma}$$

これから

$$J_0(\boldsymbol{q}) = \int d^3x\,\exp(i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{x})\frac{1}{(2\pi)^3}\int d^3p\,d^3p'\exp\left(i(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}')\cdot\boldsymbol{x}\right)\sum_\sigma a^\dagger_{\boldsymbol{p}'\sigma} a_{\boldsymbol{p}\sigma}$$
$$= \int d^3p\,d^3p'\delta(\boldsymbol{q}+\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}')\sum_\sigma a^\dagger_{\boldsymbol{p}'\sigma}a_{\boldsymbol{p}\sigma} = \int d^3p\sum_\sigma a^\dagger_{\boldsymbol{p}+\boldsymbol{q}\,\sigma}a_{\boldsymbol{p}\sigma}$$

になるから

$$R_{\rm L}(q_0,q) = \sum_n \langle 0|J_0^\dagger(\boldsymbol{q})|n\rangle\langle n|J_0(\boldsymbol{q})|0\rangle\,\delta(\omega_n-q_0)$$
$$= \sum_n\int d^3p\,d^3p'\sum_{\sigma\sigma'}\langle 0|a^\dagger_{\boldsymbol{p}'\sigma'}a_{\boldsymbol{p}'+\boldsymbol{q}\,\sigma'}|n\rangle\langle n|a^\dagger_{\boldsymbol{p}+\boldsymbol{q}\,\sigma}a_{\boldsymbol{p}\sigma}|0\rangle\,\delta(\omega_n-q_0)$$

$\langle n|a^\dagger_{\boldsymbol{p}+\boldsymbol{q}\,\sigma}a_{\boldsymbol{p}\sigma}|0\rangle \neq 0$ である $|\,n\,\rangle$ は $|\,n\,\rangle = a^\dagger_{\boldsymbol{p}+\boldsymbol{q}\,\sigma}a_{\boldsymbol{p}\sigma}|\,0\,\rangle$ 以外にはない。このとき

$$\omega_n = \frac{(\boldsymbol{p}+\boldsymbol{q})^2}{2M^*} - \frac{\boldsymbol{p}^2}{2M^*}$$

であるから

$$R_{\rm L}(q_0,q) = \int d^3p\,d^3p'\sum_{\sigma\sigma'}\langle 0|a^\dagger_{\boldsymbol{p}'\sigma'}a_{\boldsymbol{p}'+\boldsymbol{q}\,\sigma'}\sum_n|\,n\,\rangle\langle\,n\,|\,a^\dagger_{\boldsymbol{p}+\boldsymbol{q}\,\sigma}a_{\boldsymbol{p}\sigma}|0\rangle\,\delta\left(q_0 - \frac{(\boldsymbol{p}+\boldsymbol{q})^2}{2M^*}+\frac{\boldsymbol{p}^2}{2M^*}\right)$$
$$= \int d^3p\,d^3p'\sum_{\sigma\sigma'}\langle 0|a^\dagger_{\boldsymbol{p}'\sigma'}a_{\boldsymbol{p}'+\boldsymbol{q}\,\sigma'}a^\dagger_{\boldsymbol{p}+\boldsymbol{q}\,\sigma}a_{\boldsymbol{p}\sigma}|0\rangle\,\delta\left(q_0 - \frac{(\boldsymbol{p}+\boldsymbol{q})^2}{2M^*}+\frac{\boldsymbol{p}^2}{2M^*}\right)$$

フェルミガス模型では $|\,0\,\rangle$ は $p\le k_{\rm p}$ である状態は占有されているから, $a^\dagger_{\boldsymbol{p}+\boldsymbol{q}\,\sigma}a_{\boldsymbol{p}\sigma}|\,0\,\rangle\neq 0$ であるためには $p\le k_{\rm p}$, $|\boldsymbol{p}+\boldsymbol{q}|>k_{\rm p}$ である。このとき $\langle\,0\,|\,a^\dagger_{\boldsymbol{p}+\boldsymbol{q}\,\sigma}=0$ になるから

$$\langle 0|a^\dagger_{\boldsymbol{p}'\sigma'}a_{\boldsymbol{p}'+\boldsymbol{q}\,\sigma'}a^\dagger_{\boldsymbol{p}+\boldsymbol{q}\,\sigma}a_{\boldsymbol{p}\sigma}|0\rangle = \delta(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}')\,\delta_{\sigma\sigma'}\langle 0|a^\dagger_{\boldsymbol{p}'\sigma'}a_{\boldsymbol{p}\sigma}|0\rangle + \langle 0|a^\dagger_{\boldsymbol{p}+\boldsymbol{q}\,\sigma}a^\dagger_{\boldsymbol{p}'\sigma'}a_{\boldsymbol{p}'+\boldsymbol{q}\,\sigma'}a_{\boldsymbol{p}\sigma}|0\rangle$$
$$= \delta(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}')\,\delta_{\sigma\sigma'}\langle 0|a^\dagger_{\boldsymbol{p}'\sigma'}a_{\boldsymbol{p}\sigma}|0\rangle$$
$$= \delta(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}')\,\delta(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}')\,\delta_{\sigma\sigma'}$$

デルタ関数の 2 乗は

$$\delta(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}')\,\delta(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}') = \delta(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}')\int\frac{d^3x}{(2\pi)^3}\exp(i\boldsymbol{x}\cdot(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}'))\Big|_{\boldsymbol{p}=\boldsymbol{p}'} = \delta(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}')\frac{V}{(2\pi)^3}$$

と見なす。ただし, $V=$ 系の体積 $=\infty$ である。陽子数を Z とすると

$$\text{陽子密度} = \frac{Z}{V} = \frac{k_{\rm p}^3}{3\pi^2}$$

であるから

$$\delta(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}')\,\delta(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}') = \delta(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}')\,\frac{3Z}{8\pi k_{\rm p}^3}$$

これから

$$R_{\mathrm{L}}(q_0,q)=\frac{3Z}{4\pi k_{\mathrm{p}}^3}\int d^3p\,\theta(k_{\mathrm{p}}-|\boldsymbol{p}|)\,\theta(|\boldsymbol{p}+\boldsymbol{q}|-k_{\mathrm{p}})\,\delta\biggl(q_0-\frac{(\boldsymbol{p}+\boldsymbol{q})^2}{2M^*}+\frac{\boldsymbol{p}^2}{2M^*}\biggr)$$
$$=\frac{3Z}{4\pi k_{\mathrm{p}}^3}\int_0^{k_{\mathrm{p}}} d^3p\,\theta(|\boldsymbol{p}+\boldsymbol{q}|-k_{\mathrm{p}})\,\delta\biggl(q_0-\frac{(\boldsymbol{p}+\boldsymbol{q})^2}{2M^*}+\frac{\boldsymbol{p}^2}{2M^*}\biggr)$$

になる。

簡単のため $q>2k_{\mathrm{p}}$ の場合を考える。$p\le k_{\mathrm{p}}$ である任意の $\boldsymbol{p}$ に対して

$$(\boldsymbol{p}+\boldsymbol{q})^2\ge(p-q)^2\ge k_{\mathrm{p}}^2$$

であるから $\theta(|\boldsymbol{p}+\boldsymbol{q}|-k_{\mathrm{p}})=1$ になる ($q<2k_{\mathrm{p}}$ の場合 $\theta(|\boldsymbol{p}+\boldsymbol{q}|-k_{\mathrm{p}})=1$ のため $\boldsymbol{p}$ の方向に制限がつく)。したがって

$$R_{\mathrm{L}}(q_0,q)=\frac{3Z}{4\pi k_{\mathrm{p}}^3}\int_0^{k_{\mathrm{p}}} d^3p\,\delta\biggl(q_0-\frac{(\boldsymbol{p}+\boldsymbol{q})^2}{2M^*}+\frac{\boldsymbol{p}^2}{2M^*}\biggr)\tag{4.47}$$
$$=\frac{3Z}{2k_{\mathrm{p}}^3}\int_0^{k_{\mathrm{p}}} dp\,p^2\int_{-1}^{1}dt\;\delta\biggl(q_0-\frac{q^2}{2M^*}-\frac{p\,q}{M^*}t\biggr)$$

ここで

$$x=\frac{M^*}{p\,q}\left(q_0-\frac{q^2}{2M^*}\right)$$

とおくと

$$R_{\mathrm{L}}(q_0,q)=\frac{3Z}{2k_{\mathrm{p}}^3}\int_0^{k_{\mathrm{p}}} dp\,p^2\int_{-1}^{1}dt\,\delta\Bigl(\frac{p\,q}{M^*}(x-t)\Bigr)=\frac{3ZM^*}{2k_{\mathrm{p}}^3q}\int_0^{k_{\mathrm{p}}} dp\,p\int_{-1}^{1}dt\,\delta(x-t)$$
$$=\frac{3ZM^*}{2k_{\mathrm{p}}^3q}\int_0^{k_{\mathrm{p}}} dp\,p\,\theta(1-|x|)$$

になる。$|x|<1$ の条件は x の定義から

$$p>p_{\min}=\frac{M^*}{q}\left|q_0-\frac{q^2}{2M^*}\right|$$

である。したがって, $p_{\min}<k_{\mathrm{p}}$ の場合 p の積分領域は $p_{\min}\le p\le k_{\mathrm{p}}$ になるから

$$R_{\mathrm{L}}(q_0,q)=\frac{3ZM^*}{2k_{\mathrm{p}}^3q}\int_{p_{\min}}^{k_{\mathrm{p}}} dp\,p=\frac{3ZM^*}{4k_{\mathrm{p}}^3q}\left(k_{\mathrm{p}}^2-p_{\min}^2\right)=\frac{3ZM^*}{4k_{\mathrm{p}}q}\left[1-\frac{M^{*2}}{k_{\mathrm{p}}^2q^2}\left(q_0-\frac{q^2}{2M^*}\right)^2\right]$$

一方, $p_{\min}>k_{\mathrm{p}}$ の場合 $R_{\mathrm{L}}(q_0,q)=0$ である。まとめると $q>2k_{\mathrm{p}}$ のとき

$$R_{\mathrm{L}}(q_0,q)=\begin{cases}\dfrac{3ZM^*}{4k_{\mathrm{p}}q}\left[1-\left(\dfrac{M^*}{k_{\mathrm{p}}q}\right)^2\left(q_0-\dfrac{q^2}{2M^*}\right)^2\right], & \left|q_0-\dfrac{q^2}{2M^*}\right|<\dfrac{k_{\mathrm{p}}q}{M^*}\\[2ex] 0, & \text{その他}\end{cases}\tag{4.48}$$

になる。励起エネルギー $q_0=q^2/2M^*$ を中心に幅が約 $k_{\mathrm{p}}q/M^*$ で高さが M^* に比例するピークになる (R_{T} も同様)。

1983 年にサックレーのデータが出るまでは, 準弾性散乱は微分断面積だけが測定され, 有効質量 M^* を適当に選ぶと非相対論的フェルミガスで説明できた (R. R. Whitney et al., Phys. Rev. **C9** (1974) 2230)。ところが, 83 年以降になると, 実験精度の向上の結果, 微分断面積から 2 つの応答関

数 R_{L}, R_{T} を分離できるようになり事情が変わった (P. Barreau et al., Nucl. Phys. **A402** (1983) 515)。陽子の電磁的広がりを考慮すると

$$J_0(\boldsymbol{q}) = G_E(q_\mu^2) \int d^3x \, \exp(i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{x}) J_0(\boldsymbol{x})$$

とすべきであるから

$$R_{\mathrm{L}}(q_0, q) = G_E^2(q_\mu^2) \Big(R_{\mathrm{L}}(q_0, q) \Big)_{\mathrm{point}}$$

ただし $\Big(R_{\mathrm{L}}(q_0, q) \Big)_{\mathrm{point}}$ は (4.48) である。したがって

$$C(q) = \int dq_0 \, \frac{R_{\mathrm{L}}(q_0, q)}{G_E^2(q_\mu^2)} = \frac{3Z}{4\pi k_{\mathrm{p}}^3} \int_0^{k_{\mathrm{p}}} d^3p = Z, \qquad q \geq 2k_{\mathrm{p}} \tag{4.49}$$

である。これをクーロン和という。$C(q)/Z$ の実験データをまとめると, $2k_{\mathrm{p}} \approx 0.5$ GeV でも実験値は 1 よりかなり小さい (J. Morgenstern and Z. E. Meziani, Phys. Lett. **B515** (2001) 269)。まるで, 原子核の電荷 Ze がどこかに消えてしまったかのようである。

4.7 相関関数

1 体演算子 $F(\boldsymbol{q})$ の応答関数

$$R(q_0, q) = \sum_n \Big| \langle n | F(\boldsymbol{q}) | 0 \rangle \Big|^2 \delta(\omega_n - q_0)$$

を平均場近似で求める。核子の 1 粒子ハミルトニアンを h_0 とし, h_0 の固有状態を $\varphi_\alpha(\boldsymbol{x})$ とする :

$$h_0 \, \varphi_\alpha(\boldsymbol{x}) = E_\alpha \varphi_\alpha(\boldsymbol{x})$$

核子は相対論的に扱う。$\varphi_\alpha(\boldsymbol{x})$ は Dirac 方程式の解である 4 成分スピノールである。基底状態 $|\,0\,\rangle$ で占有されている状態 (空孔状態) を $|\,h\,\rangle$, 非占有の状態 (粒子状態) を $|\,p\,\rangle$ で表す。$|\,h\,\rangle$ には反核子の状態も含む。$F(\boldsymbol{q})$ は 1 体演算子であるから

$$R(q_0, q) = \sum_{ph} \Big| \langle ph | F(\boldsymbol{q}) | 0 \rangle \Big|^2 \delta(\omega_{ph} - q_0)\,, \qquad |\,ph\,\rangle = a_p^\dagger a_h |\,0\,\rangle\,, \quad \omega_{ph} = E_p - E_h > 0$$

になる。$|\,h\,\rangle$ は束縛状態であるが, $|\,p\,\rangle$ は束縛状態だけでなく連続状態もある。準弾性散乱のような高励起状態を扱う場合, 連続状態を正確に取り込む必要がある。ところで, 数値計算上, 連続的に変化する $\langle ph | F(\boldsymbol{q}) | 0 \rangle$ を求め p について積分することは困難である。ここでは, 以下のようにして $|\,p\,\rangle$ を直接扱うことはしないで, この困難さを回避する。

$\varepsilon \to +0$ のとき

$$\frac{1}{x \mp i\varepsilon} = \mathrm{P}\frac{1}{x} \pm i\pi\delta(x)$$

より

$$R(q_0, q) = \frac{1}{\pi} \, \mathrm{Im}\mathit{\Pi}(q_0, q)\,, \qquad \mathit{\Pi}(q_0, q) = \sum_{ph} \left(\frac{|\langle ph | F(\boldsymbol{q}) | 0 \rangle|^2}{\omega_{ph} - q_0 - i\varepsilon} + \frac{\big|\langle ph | F^\dagger(\boldsymbol{q}) | 0 \rangle\big|^2}{\omega_{ph} + q_0 + i\varepsilon} \right)$$

第 2 項の寄与は

$$- \sum_{ph} \Big| \langle ph | F^\dagger(\boldsymbol{q}) | 0 \rangle \Big|^2 \delta(\omega_{ph} + q_0)$$

であるから $q_0 > 0$ では寄与しないが, p の和を回避するため加えておく。1 体演算子

$$F = \sum_{\alpha\beta} \langle\alpha|f|\beta\rangle\, a_\alpha^\dagger a_\beta$$

の場合 $\langle ph|F|0\rangle = \langle p|f|h\rangle$ であるから

$$\Pi(q_0, q) = \sum_{ph} \left(\frac{|\langle p|f(\boldsymbol{q})|h\rangle|^2}{\omega_{ph} - q_0 - i\varepsilon} + \frac{\left|\langle p|f^\dagger(\boldsymbol{q})|h\rangle\right|^2}{\omega_{ph} + q_0 + i\varepsilon} \right)$$

粒子状態の和 = 任意の和 − 空孔の和 より

$$\begin{aligned}\Pi(q_0, q) &= \sum_{\alpha h} \left(\frac{|\langle \alpha|f(\boldsymbol{q})|h\rangle|^2}{\omega_{\alpha h} - q_0 - i\varepsilon} + \frac{\left|\langle \alpha|f^\dagger(\boldsymbol{q})|h\rangle\right|^2}{\omega_{\alpha h} + q_0 + i\varepsilon} \right) \\ &\quad - \sum_{hh'} \left(\frac{|\langle h'|f(\boldsymbol{q})|h\rangle|^2}{\omega_{h'h} - q_0 - i\varepsilon} + \frac{\left|\langle h'|f^\dagger(\boldsymbol{q})|h\rangle\right|^2}{\omega_{h'h} + q_0 + i\varepsilon} \right)\end{aligned}$$

α は全ての状態について和をとる。2 行目の第 1 項で h と h' を入れ替えると $\omega_{hh'} = -\omega_{h'h}$ であるから

$$2\text{ 行目の第 1 項} = -\sum_{hh'} \frac{|\langle h|f(\boldsymbol{q})|h'\rangle|^2}{-\omega_{h'h} - q_0 - i\varepsilon} = +\sum_{hh'} \frac{\left|\langle h'|f^\dagger(\boldsymbol{q})|h\rangle\right|^2}{\omega_{h'h} + q_0 + i\varepsilon}$$

したがって, 2 行目の第 2 項目と打ち消しあい

$$\Pi(q_0, q) = \sum_{\alpha h} \left(\frac{|\langle \alpha|f(\boldsymbol{q})|h\rangle|^2}{\omega_{\alpha h} - q_0 - i\varepsilon} + \frac{\left|\langle \alpha|f^\dagger(\boldsymbol{q})|h\rangle\right|^2}{\omega_{\alpha h} + q_0 + i\varepsilon} \right)$$

になる。α は任意であるから $\omega_{\alpha h} < 0$ も存在し, $q_0 > 0$ でも第 2 項の虚部は 0 ではない。これは第 1 項でパウリ原理を破る遷移の寄与を打ち消すために必要である。

応答関数を求める場合, f は電荷密度あるいは電流密度であるから

$$\langle\alpha|f(\boldsymbol{q})|\beta\rangle = \int d^3x\, \exp(i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{x})\, \varphi_\alpha^\dagger(\boldsymbol{x})\Gamma\varphi_\beta(\boldsymbol{x}), \qquad \Gamma = 4\times 4\text{ 行列} \tag{4.50}$$

と表せる。したがって

$$\begin{aligned}\Pi(q_0, q) &= \sum_{\alpha h} \int d^3x\, d^3y\, \exp(-i\boldsymbol{q}\cdot(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y})) \\ &\quad \times \left(\frac{\varphi_h^\dagger(\boldsymbol{x})\Gamma^\dagger\varphi_\alpha(\boldsymbol{x})\,\varphi_\alpha^\dagger(\boldsymbol{y})\Gamma\varphi_h(\boldsymbol{y})}{\omega_{\alpha h} - q_0 - i\varepsilon} + \left[\frac{\varphi_h^\dagger(\boldsymbol{x})\Gamma\varphi_\alpha(\boldsymbol{x})\,\varphi_\alpha^\dagger(\boldsymbol{y})\Gamma^\dagger\varphi_h(\boldsymbol{y})}{\omega_{\alpha h} + q_0 - i\varepsilon} \right]^* \right) \\ &= \sum_h \int d^3x\, d^3y\, \exp(-i\boldsymbol{q}\cdot(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y})) \\ &\quad \times \left(\varphi_h^\dagger(\boldsymbol{x})\Gamma^\dagger G(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y} : E_h + q_0)\Gamma\varphi_h(\boldsymbol{y}) + \left[\varphi_h^\dagger(\boldsymbol{x})\Gamma G(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y} : E_h - q_0)\Gamma^\dagger\varphi_h(\boldsymbol{y}) \right]^* \right)\end{aligned} \tag{4.51}$$

ただし

$$G(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y} : E) = \sum_\alpha \frac{\varphi_\alpha(\boldsymbol{x})\,\varphi_\alpha^\dagger(\boldsymbol{y})}{\omega_\alpha - E - i\varepsilon} \tag{4.52}$$

である。

$$\Big(h_0(\boldsymbol{x})-E\Big)G(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}:E)=\sum_\alpha \frac{\Big(h_0(\boldsymbol{x})-E\Big)\varphi_\alpha(\boldsymbol{x})}{\omega_\alpha-E-i\varepsilon}\,\varphi_\alpha^\dagger(\boldsymbol{y})$$
$$=\sum_\alpha \frac{\omega_\alpha-E}{\omega_\alpha-E-i\varepsilon}\,\varphi_\alpha(\boldsymbol{x})\,\varphi_\alpha^\dagger(\boldsymbol{y})$$
$$=\sum_\alpha \varphi_\alpha(\boldsymbol{x})\,\varphi_\alpha^\dagger(\boldsymbol{y})=\delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}) \tag{4.53}$$

であるから G は 1 粒子ハミルトニアン h_0 の**グリーン関数**である。非相対論と同様に, G を全ての 1 状態状態の和 (4.52) とは別の表現 (4.63) ができる。この表現を使うと (4.51) から 1 粒子状態については空孔状態の和だけで応答関数が求まる。

4.8　グリーン関数

自由粒子　自由粒子の場合 (4.52) の和 (積分) を実行できる。h_0 の規格化された固有状態は

$$\text{正エネルギー解}\quad E_p \qquad \varphi^{(+)}_{p\sigma}(\boldsymbol{x})=\frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\sqrt{\frac{M}{E_p}}\,e^{i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}}\,u(\boldsymbol{p},\sigma)$$

$$\text{負エネルギー解}\quad -E_p \quad \varphi^{(-)}_{p\sigma}(\boldsymbol{x})=\frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\sqrt{\frac{M}{E_p}}\,e^{-i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}}\,v(\boldsymbol{p},\sigma)$$

であるから $\boldsymbol{R}=\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}$ とすると

$$G(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}:E)=\int\! d^3p\sum_\sigma\left(\frac{\varphi^{(+)}_{p\sigma}(\boldsymbol{x})\,\overline{\varphi}^{(+)}_{p\sigma}(\boldsymbol{y})}{E_p-E-i\varepsilon}+\frac{\varphi^{(-)}_{p\sigma}(\boldsymbol{x})\,\overline{\varphi}^{(-)}_{p\sigma}(\boldsymbol{y})}{-E_p-E-i\varepsilon}\right)\gamma_0$$
$$=\int\frac{d^3p}{(2\pi)^3}\frac{M}{E_p}\sum_\sigma\left(e^{i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{R}}\frac{u(\boldsymbol{p},\sigma)\,\overline{u}(\boldsymbol{p},\sigma)}{E_p-E-i\varepsilon}-e^{-i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{R}}\frac{v(\boldsymbol{p},\sigma)\,\overline{v}(\boldsymbol{p},\sigma)}{E_p+E+i\varepsilon}\right)\gamma_0$$

上式に

$$\sum_\sigma u(\boldsymbol{p},\sigma)\,\overline{u}(\boldsymbol{p},\sigma)=\frac{\not p+M}{2M}\,,\qquad \sum_\sigma v(\boldsymbol{p},\sigma)\,\overline{v}(\boldsymbol{p},\sigma)=\frac{\not p-M}{2M}$$

を代入すると

$$G(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}:E)=\int\frac{d^3p}{(2\pi)^3}\frac{1}{2E_p}\left(e^{i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{R}}\frac{E_p+\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{p}+M\gamma_0}{E_p-E-i\varepsilon}-e^{-i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{R}}\frac{E_p+\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{p}-M\gamma_0}{E_p+E+i\varepsilon}\right)$$

第 2 項で $\boldsymbol{p}\to-\boldsymbol{p}$ と置き換えれば

$$G(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}:E)=\int\frac{d^3p}{(2\pi)^3}\frac{e^{i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{R}}}{2E_p}\left(\frac{E_p+\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{p}+M\gamma_0}{E_p-E-i\varepsilon}-\frac{E_p-\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{p}-M\gamma_0}{E_p+E+i\varepsilon}\right)$$

ここで

$$\frac{E_p+\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{p}+M\gamma_0}{E_p-E-i\varepsilon}=1+\frac{E+\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{p}+M\gamma_0}{E_p-E-i\varepsilon}\,,\qquad \frac{E_p-\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{p}-M\gamma_0}{E_p+E+i\varepsilon}=1-\frac{E+\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{p}+M\gamma_0}{E_p+E+i\varepsilon}$$

であるから

$$G(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}:E)=\int\frac{d^3p}{(2\pi)^3}\frac{E+\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{p}+M\gamma_0}{2E_p}\left(\frac{1}{E_p-E-i\varepsilon}+\frac{1}{E_p+E+i\varepsilon}\right)e^{i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{R}}$$
$$=\Big(E+h_0(\boldsymbol{x})\Big)\int\frac{d^3p}{(2\pi)^3}\frac{e^{i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{R}}}{E_p^2-(E+i\varepsilon)^2}\,,\qquad h_0(\boldsymbol{x})=-\,i\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{\nabla}_x+M\gamma_0$$

になる。$\boldsymbol{\nabla}_x$ は $\boldsymbol{x}$ に関する gradient である。

$$I = \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3}\frac{e^{i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{R}}}{E_p^2-(E+i\varepsilon)^2} = \frac{1}{4\pi^2}\int_0^\infty dp\,\frac{p^2}{E_p^2-(E+i\varepsilon)^2}\int_{-1}^1 dt\,e^{ipRt}$$
$$= \frac{1}{4\pi^2 iR}\int_{-\infty}^{\infty}dp\,\frac{p}{E_p^2-(E+i\varepsilon)^2}\,e^{ipR}$$
$$= \frac{1}{4\pi^2 iR}\int_{-\infty}^{\infty}dp\,\frac{p}{p^2-k^2-2iE\varepsilon}\,e^{ipR}$$

$p = Qe^{i\theta}$ とすると

$$\text{被積分関数} \xrightarrow{Q\to\infty} \frac{e^{ipR}}{p} = \frac{\exp(iRQ\cos\theta - RQ\sin\theta)}{Qe^{i\theta}}$$

より $\sin\theta > 0$ ならば 0 に収束する。したがって, 積分路に上半面の経路 $Qe^{i\theta}$, ($0\le\theta\le\pi, Q\to\infty$) を加えてもよい。被積分関数は

$$p^2 = k^2 + 2iE\varepsilon = \begin{cases} k^2+i\varepsilon\,, & E>0 \\ k^2-i\varepsilon\,, & E<0 \end{cases}$$

に極をもつ。$E > M$ のとき $k=\sqrt{E^2-M^2}$ は正の実数で $p = \pm(k+i\varepsilon)$ が極になるから, 上半面にある極 $k+i\varepsilon$ の留数より $I = e^{ikR}/(4\pi R)$ である。したがって

$$G(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}:E) = \Big(E+h_0(\boldsymbol{x})\Big)\frac{e^{ikR}}{4\pi R} = \left(E + M\gamma_0 + \frac{\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{R}}{R}\left(k+\frac{i}{R}\right)\right)\frac{e^{ikR}}{4\pi R} \tag{4.54}$$

$E^2 < M^2$ の場合, $k = i\sqrt{M^2-E^2}$ は純虚数で $p=\pm k$ が極になる。上半面にある極 k の留数より上と同じになる。ただし $e^{ikR} = e^{-\sqrt{M^2-E^2}\,R}$ である。$h_0^2(\boldsymbol{x}) = -\boldsymbol{\nabla}_x^2 + M^2$ であるから

$$\Big(h_0(\boldsymbol{x})-E\Big)G(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}:E) = \Big(h_0(\boldsymbol{x})-E\Big)\Big(E+h_0(\boldsymbol{x})\Big)\frac{e^{\pm ikR}}{4\pi R} = \Big(-\boldsymbol{\nabla}_x^2 - k^2\Big)\frac{e^{\pm ikR}}{4\pi R} = \delta(\boldsymbol{R})$$

になり (4.53) を確かに満たす。なお, Green 関数の分母 $1/(\omega_\alpha - E - i\varepsilon)$ にある微小量 $i\varepsilon$ が無限遠での境界条件を規定する。$1/(\omega_\alpha - E + i\varepsilon)$ ならば (4.54) は e^{ikR} の代わりに e^{-ikR} になる。

球対称ポテンシャル　1 粒子ハミルトニアン h_0 が球対称なポテンシャル $V_{\rm S}(x)$, $V_0(x)$ からなる

$$h_0 = -i\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{\nabla} + \gamma^0\Big(M + V_{\rm S}(x)\Big) + V_0(x)$$

のとき $\Big(h_0 - E\Big)\varphi(\boldsymbol{x}) = 0$ の解は

$$\varphi(\boldsymbol{x}) = \frac{1}{x}\begin{pmatrix} u(x)\mathcal{Y}_{\ell jm}(\hat{\boldsymbol{x}}) \\ i\,v(x)\mathcal{Y}_{\ell' jm}(\hat{\boldsymbol{x}})\end{pmatrix}, \qquad \ell' = \begin{cases} \ell-1\,, & j=\ell-1/2 \text{ のとき} \\ \ell+1\,, & j=\ell+1/2 \text{ のとき}\end{cases} \tag{4.55}$$

とおけ, ディラック方程式は

$$\frac{du}{dx} = -\frac{\kappa_{\ell j}}{x}u(x) + \Big(M+V_{\rm S}-V_0+E\Big)v(x) \tag{4.56}$$

$$\frac{dv}{dx} = +\frac{\kappa_{\ell j}}{x}\,v(r) + \Big(M+V_{\rm S}+V_0-E\Big)u(x) \tag{4.57}$$

ただし

$$\kappa_{\ell j} = (-1)^{j+\ell+1/2}\left(j+\frac{1}{2}\right) = \begin{cases} \ell\,, & j=\ell-1/2 \text{ のとき} \\ -\ell-1\,, & j=\ell+1/2 \text{ のとき}\end{cases} \tag{4.58}$$

になる。(4.56) から

$$v(x) = \frac{1}{M + V_{\rm S} - V_0 + E}\left(\frac{d}{dx} + \frac{\kappa_{\ell j}}{x}\right) u(x) \tag{4.59}$$

これを (4.57) に代入すると

$$\left(\frac{d}{dx} - \frac{\kappa_{\ell j}}{x}\right)\frac{1}{M + V_{\rm S} - V_0 + E}\left(\frac{d}{dx} + \frac{\kappa_{\ell j}}{x}\right) u(x) - \Big(M + V_{\rm S} + V_0 - E\Big) u(x) = 0 \tag{4.60}$$

である。

原点近傍　$x \to 0$ のとき $u = x^a + \cdots$ とすると

$$\frac{1}{M + V_{\rm S}(0) - V_0(0) + E}\left(\frac{d}{dx} - \frac{\kappa_{\ell j}}{x}\right)\left(\frac{d}{dx} + \frac{\kappa_{\ell j}}{x}\right) x^a - \Big(M + V_{\rm S}(0) + V_0(0) - E\Big) x^a + \cdots = 0$$

つまり

$$\left(\frac{d^2}{dx^2} - \frac{\kappa_{\ell j}(\kappa_{\ell j}+1)}{x^2}\right) x^a - \Big((M + V_{\rm S}(0))^2 - (V_0(0) - E)^2\Big) x^a + \cdots = 0$$

したがって

$$a(a-1) - \kappa_{\ell j}(\kappa_{\ell j}+1) - \Big((M + V_{\rm S}(0))^2 - (V_0(0) - E)^2\Big) x^2 + \cdots = 0$$

$x \to 0$ のとき第 2 項は無視できるから

$$a(a-1) = \kappa_{\ell j}(\kappa_{\ell j}+1) = \ell(\ell+1)\,, \quad \therefore \quad a = \ell + 1\,, -\ell$$

原点で正則な解 $u(x)/x = x^\ell + \cdots$ と発散する解 $u(x)/x = x^{-\ell-1} + \cdots$ がある。原点で正則な解を

$$F_{\ell jm}(\boldsymbol{x}) = \frac{1}{x}\begin{pmatrix} f_{\ell j}(x)\,\mathcal{Y}_{\ell jm}(\hat{\boldsymbol{x}}) \\ i\,g_{\ell j}(x)\,\mathcal{Y}_{\ell' jm}(\hat{\boldsymbol{x}}) \end{pmatrix}, \quad f_{\ell j}(x) \xrightarrow{x\to 0} x^{\ell+1} \tag{4.61}$$

で表す。(4.59) から $\kappa_{\ell j} = \ell$ の場合

$$g_{\ell j}(x) \xrightarrow{x\to 0} \frac{\ell + 1 + \kappa_{\ell j}}{M + V_{\rm S}(0) - V_0(0) + E}\, x^\ell = \frac{2\ell + 1}{M + V_{\rm S}(0) - V_0(0) + E}\, x^\ell$$

$\kappa_{\ell j} = -\ell - 1$ の場合 $g_{\ell j} = 0$ になるから, 次のオーダーまで求める必要がある。(4.57) から

$$g_{\ell j} \xrightarrow{x\to 0} \frac{M + V_{\rm S}(0) + V_0(0) - E}{\ell + 2 - \kappa_{\ell j}}\, x^{\ell+2} = \frac{M + V_{\rm S}(0) + V_0(0) - E}{2\ell + 3}\, x^{\ell+2}$$

である。$F_{\ell jm}(\boldsymbol{x})$ に対しては無限遠での境界条件は設定しない。E が束縛状態の固有値に等しい場合 $F_{\ell jm}(\boldsymbol{x}) \xrightarrow{x\to\infty} 0$ になるが, 一般には $x \to \infty$ で有界とは限らない。$f_{\ell j}\,, g_{\ell j}$ は実関数にできる。

無限遠　$x \to \infty$ のとき $V_{\rm S}\,,\ V_0 \to 0$ ならば (4.60) は

$$\left(\frac{d^2}{dx^2} - \frac{\ell(\ell+1)}{x^2} + k^2\right) u = 0\,, \qquad k = \begin{cases} \sqrt{E^2 - M^2} & E^2 > M^2 \\ i\sqrt{M^2 - E^2} & E^2 < M^2 \end{cases}$$

になる。この微分方程式の独立な 2 つの解は, 球ベッセル関数 j_ℓ, n_ℓ, あるいはハンケル関数 $h_\ell^{(\pm)} = j_\ell \pm i n_\ell$ を用いて

$$kxj_\ell(kx)\,, \quad kxn_\ell(kx) \quad \text{または} \quad kxh_\ell^{(+)}(kx)\,, \quad kxh_\ell^{(-)}(kx)$$

と表せる。

$$\rho\, h_\ell^{(\pm)}(\rho) = e^{\pm\, i(\rho-(\ell+1)\pi/2)} \sum_{k=0}^{\ell} \frac{(n+k)!}{k!(n-k)!} \left(\frac{\pm\, i}{2\rho}\right)^k \xrightarrow{\rho\to\infty} e^{\pm\, i(\rho-(\ell+1)\pi/2)}$$

であるから (メシアの付録とは位相が異なる), 外向き球面波になる解を考えて

$$U_{\ell jm}(\boldsymbol{x}) = \frac{1}{x} \begin{pmatrix} u_{\ell j}(x)\, \mathcal{Y}_{\ell jm}(\hat{\boldsymbol{x}}) \\ i\, v_{\ell j}(x)\, \mathcal{Y}_{\ell' jm}(\hat{\boldsymbol{x}}) \end{pmatrix}, \quad u_{\ell j}(x) \xrightarrow{x\to\infty} kxh_\ell^{(+)}(kx) \tag{4.62}$$

とする。$h_\ell^{(\pm)}(\rho)$ の性質 ($\ell \neq 0$)

$$(2\ell+1)h_\ell^{(\pm)} = \rho\Big(h_{\ell-1}^{(\pm)} + h_{\ell+1}^{(\pm)}\Big), \quad h_{\ell-1}^{(\pm)} = \left(\frac{d}{d\rho} + \frac{\ell+1}{\rho}\right) h_\ell^{(\pm)}, \quad h_\ell^{(\pm)} = \left(-\frac{d}{d\rho} + \frac{\ell-1}{\rho}\right) h_{\ell-1}^{(\pm)}$$

から $j = \ell \pm 1/2$ のとき

$$v_{\ell j}(x) = \frac{1}{M+E}\left(\frac{d}{dx} + \frac{\kappa_{\ell j}}{x}\right) u_{\ell j}(x) \xrightarrow{x\to\infty} \mp \frac{k}{M+E}\, kxh_{\ell\pm 1}^{(+)}(kx)$$

になる。$U_{\ell jm}(\boldsymbol{x})$ に対しては原点での境界条件は設定しない。$x\to\infty$ で e^{+ikx} になるから, $E^2 > M^2$ の場合は外向きの球面波, $E^2 < M^2$ の場合は 0 に収束する解である。$E^2 < M^2$ で E が束縛状態の固有値に等しい場合 $U_{\ell jm}(\boldsymbol{x})$ は原点で正則であるが, 一般には原点で正則とは限らない。$E^2 < M^2$ の場合, $u_{\ell j}$, $v_{\ell j}$ は実関数にできるが, $E^2 > M^2$ の場合は複素関数である。

原点で $x^{-\ell}$ である解を

$$\varPhi_{\ell jm}(\boldsymbol{x}) = \frac{1}{x} \begin{pmatrix} a_{\ell j}(x)\, \mathcal{Y}_{\ell jm}(\hat{\boldsymbol{x}}) \\ i\, b_{\ell j}(x)\, \mathcal{Y}_{\ell' jm}(\hat{\boldsymbol{x}}) \end{pmatrix}, \quad a_{\ell j}(x) \xrightarrow{x\to 0} x^{-\ell}$$

とすると, $(h_0 - E)\,\varphi(\boldsymbol{x}) = 0$ の一般解は $F_{\ell jm}(\boldsymbol{x})$ と $\varPhi_{\ell jm}(\boldsymbol{x})$ の線形結合で表せる。また

$$U_{\ell jm}^{(\pm)}(\boldsymbol{x}) = \frac{1}{x} \begin{pmatrix} u_{\ell j}^{(\pm)}(x)\, \mathcal{Y}_{\ell jm}(\hat{\boldsymbol{x}}) \\ i\, v_{\ell j}^{(\pm)}(x)\, \mathcal{Y}_{\ell' jm}(\hat{\boldsymbol{x}}) \end{pmatrix}, \quad u_{\ell j}^{(\pm)}(x) \xrightarrow{x\to\infty} kxh_\ell^{(\pm)}(kx)$$

とすると, 一般解は $U_{\ell jm}^{(+)}(\boldsymbol{x})$ と $U_{\ell jm}^{(-)}(\boldsymbol{x})$ の線形結合でも表せる。したがって

$$F_{\ell jm}(\boldsymbol{x}) = A\, U_{\ell jm}^{(+)}(\boldsymbol{x}) + B\, U_{\ell jm}^{(-)}(\boldsymbol{x}), \qquad U_{\ell jm}(\boldsymbol{x}) = U_{\ell jm}^{(+)}(\boldsymbol{x}) = C\, F_{\ell jm}(\boldsymbol{x}) + D\, \varPhi_{\ell jm}(\boldsymbol{x})$$

と表せる。E が束縛状態の固有値に一致する場合 $B = D = 0$ である。

ロンスキャン

$$W_{\ell j} = u_{\ell j}(x) g_{\ell j}(x) - v_{\ell j}(x) f_{\ell j}(x)$$

とすると, (4.56), (4.57) より

$$\begin{aligned}
\frac{dW_{\ell j}}{dx} &= \frac{du_{\ell j}}{dx}\, g_{\ell j} + u_{\ell j}\frac{dg_{\ell j}}{dx} - \frac{dv_{\ell j}}{dx}\, f_{\ell j} - v_{\ell j}\frac{df_{\ell j}}{dx} \\
&= \left[-\frac{\kappa_{\ell j}}{x} u_{\ell j} + \Big(M + V_{\mathrm{S}} - V_0 + E\Big) v_{\ell j}\right] g_{\ell j} + u_{\ell j}\left[\frac{\kappa_{\ell j}}{x} g_{\ell j} + \Big(M + V_{\mathrm{S}} + V_0 - E\Big) f_{\ell j}\right] \\
&\quad - \left[\frac{\kappa_{\ell j}}{x} v_{\ell j} + \Big(M + V_{\mathrm{S}} + V_0 - E\Big) u_{\ell j}\right] f_{\ell j} - v_{\ell j}\left[-\frac{\kappa_{\ell j}}{x} f_{\ell j} + \Big(M + V_{\mathrm{S}} - V_0 + E\Big) g_{\ell j}\right] \\
&= 0
\end{aligned}$$

になるから $W_{\ell j}$ は定数である。グリーン関数 (4.52) は

$$G(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}:E)=\sum_{\ell jm}\frac{1}{W_{\ell j}}\Big(\theta(x-y)U_{\ell jm}(\boldsymbol{x})\tilde{F}_{\ell jm}(\boldsymbol{y})+\theta(y-x)F_{\ell jm}(\boldsymbol{x})\tilde{U}_{\ell jm}(\boldsymbol{y})\Big) \tag{4.63}$$

と表せる。ただし, $\tilde{F}_{\ell jm}$, $\tilde{U}_{\ell jm}$ は 4 成分の行ベクトル

$$\tilde{F}_{\ell jm}=\frac{1}{x}\Big(\,f_{\ell j}\mathcal{Y}^{\dagger}_{\ell jm}\quad -ig_{\ell j}\mathcal{Y}^{\dagger}_{\ell' jm}\Big),\qquad \tilde{U}_{\ell jm}=\frac{1}{x}\Big(u_{\ell j}\mathcal{Y}^{\dagger}_{\ell jm}\quad -iv_{\ell j}\mathcal{Y}^{\dagger}_{\ell' jm}\Big)$$

である。$f_{\ell j}$, $g_{\ell j}$ は実数であるから $\tilde{F}_{\ell jm}=F^{\dagger}_{\ell jm}$ であるが $\tilde{U}_{\ell jm}\neq U^{\dagger}_{\ell jm}$ である。

証明　$\boldsymbol{\nabla}$ を $\boldsymbol{x}$ に関する gradient とすると

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{\nabla}\theta(x-y)U_{\ell jm}(\boldsymbol{x})&=\delta(x-y)\,\boldsymbol{\alpha}\cdot\hat{\boldsymbol{x}}U_{\ell jm}(\boldsymbol{x})+\theta(x-y)\,\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{\nabla}U_{\ell jm}(\boldsymbol{x})\\ \boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{\nabla}\theta(y-x)F_{\ell jm}(\boldsymbol{x})&=-\,\delta(x-y)\,\boldsymbol{\alpha}\cdot\hat{\boldsymbol{x}}F_{\ell jm}(\boldsymbol{x})+\theta(y-x)\,\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{\nabla}F_{\ell jm}(\boldsymbol{x})\end{aligned}$$

であるから

$$\begin{aligned}\Big(h_0(\boldsymbol{x})-E\Big)\theta(x-y)U_{\ell jm}(\boldsymbol{x})&=-i\delta(x-y)\,\boldsymbol{\alpha}\cdot\hat{\boldsymbol{x}}U_{\ell jm}(\boldsymbol{x})+\theta(x-y)\Big(h_0(\boldsymbol{x})-E\Big)U_{\ell jm}(\boldsymbol{x})\\ &=-i\delta(x-y)\,\boldsymbol{\alpha}\cdot\hat{\boldsymbol{x}}U_{\ell jm}(\boldsymbol{x})\\ \Big(h_0(\boldsymbol{x})-E\Big)\theta(y-x)F_{\ell jm}(\boldsymbol{x})&=i\delta(x-y)\,\boldsymbol{\alpha}\cdot\hat{\boldsymbol{x}}F_{\ell jm}(\boldsymbol{x})\end{aligned}$$

したがって

$$\Big(h_0(\boldsymbol{x})-E\Big)G(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}:E)=-i\sum_{\ell jm}\frac{\delta(x-y)}{W_{\ell j}}\boldsymbol{\alpha}\cdot\hat{\boldsymbol{x}}\,\Big(U_{\ell jm}(\boldsymbol{x})\tilde{F}_{\ell jm}(\boldsymbol{y})-F_{\ell jm}(\boldsymbol{x})\tilde{U}_{\ell jm}(\boldsymbol{y})\Big)$$

ところで

$$\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{x}}\,\mathcal{Y}_{\ell jm}=-\,\mathcal{Y}_{\ell' jm}\,,\qquad \boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{x}}\,\mathcal{Y}_{\ell' jm}=-\,\mathcal{Y}_{\ell jm}$$

であるから (簡単のため動径方向の波動関数の添字は省略。また, $x=y$ のみを考えればよいから (x) も省略)

$$-i\,\boldsymbol{\alpha}\cdot\hat{\boldsymbol{x}}\,U_{\ell jm}(\boldsymbol{x})=-\frac{i}{x}\begin{pmatrix}0&\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{x}}\\ \boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{x}}&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}u\,\mathcal{Y}_{\ell jm}(\hat{\boldsymbol{x}})\\ iv\,\mathcal{Y}_{\ell' jm}(\hat{\boldsymbol{x}})\end{pmatrix}=\frac{1}{x}\begin{pmatrix}-\,v\,\mathcal{Y}_{\ell jm}(\hat{\boldsymbol{x}})\\ iu\,\mathcal{Y}_{\ell' jm}(\hat{\boldsymbol{x}})\end{pmatrix}$$

これから

$$\begin{aligned}-i\,\boldsymbol{\alpha}\cdot\hat{\boldsymbol{x}}\,U_{\ell jm}(\boldsymbol{x})\tilde{F}_{\ell jm}(\boldsymbol{y})&=\frac{1}{x^2}\begin{pmatrix}-\,v\,\mathcal{Y}_{\ell jm}(\hat{\boldsymbol{x}})\\ iu\,\mathcal{Y}_{\ell' jm}(\hat{\boldsymbol{x}})\end{pmatrix}\Big(f\,\mathcal{Y}^{\dagger}_{\ell jm}(\hat{\boldsymbol{y}})\quad -ig\,\mathcal{Y}^{\dagger}_{\ell' jm}(\hat{\boldsymbol{y}})\Big)\\ &=\frac{1}{x^2}\begin{pmatrix}-\,vf\,\mathcal{Y}_{\ell jm}(\hat{\boldsymbol{x}})\mathcal{Y}^{\dagger}_{\ell jm}(\hat{\boldsymbol{y}})& i\,vg\,\mathcal{Y}_{\ell jm}(\hat{\boldsymbol{x}})\mathcal{Y}^{\dagger}_{\ell' jm}(\hat{\boldsymbol{y}})\\ i\,uf\,\mathcal{Y}_{\ell' jm}(\hat{\boldsymbol{x}})\mathcal{Y}^{\dagger}_{\ell jm}(\hat{\boldsymbol{y}})& ug\,\mathcal{Y}_{\ell' jm}(\hat{\boldsymbol{x}})\mathcal{Y}^{\dagger}_{\ell' jm}(\hat{\boldsymbol{y}})\end{pmatrix}\end{aligned}$$

$u\leftrightarrow f$, $v\leftrightarrow g$ の置き換えをすれば

$$-i\,\boldsymbol{\alpha}\cdot\hat{\boldsymbol{x}}\,F_{\ell jm}(\boldsymbol{x})\tilde{U}_{\ell jm}(\boldsymbol{y})=\frac{1}{x^2}\begin{pmatrix}-\,gu\,\mathcal{Y}_{\ell jm}(\hat{\boldsymbol{x}})\mathcal{Y}^{\dagger}_{\ell jm}(\hat{\boldsymbol{y}})& i\,gv\,\mathcal{Y}_{\ell jm}(\hat{\boldsymbol{x}})\mathcal{Y}^{\dagger}_{\ell' jm}(\hat{\boldsymbol{y}})\\ i\,fu\,\mathcal{Y}_{\ell' jm}(\hat{\boldsymbol{x}})\mathcal{Y}^{\dagger}_{\ell jm}(\hat{\boldsymbol{y}})& fv\,\mathcal{Y}_{\ell' jm}(\hat{\boldsymbol{x}})\mathcal{Y}^{\dagger}_{\ell' jm}(\hat{\boldsymbol{y}})\end{pmatrix}$$

したがって

$$
\begin{aligned}
&\Big(h_0(\boldsymbol{x})-E\Big)G(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}:E)\\
&=\frac{\delta(x-y)}{x^2}\sum_{\ell jm}\frac{1}{W_{\ell j}}\begin{pmatrix}(ug-vf)\mathcal{Y}_{\ell jm}(\hat{\boldsymbol{x}})\mathcal{Y}^\dagger_{\ell jm}(\hat{\boldsymbol{y}}) & 0\\ 0 & (ug-vf)\mathcal{Y}_{\ell' jm}(\hat{\boldsymbol{x}})\mathcal{Y}^\dagger_{\ell' jm}(\hat{\boldsymbol{y}})\end{pmatrix}\\
&=\frac{\delta(x-y)}{x^2}\sum_{\ell jm}\begin{pmatrix}\mathcal{Y}_{\ell jm}(\hat{\boldsymbol{x}})\mathcal{Y}^\dagger_{\ell jm}(\hat{\boldsymbol{y}}) & 0\\ 0 & \mathcal{Y}_{\ell' jm}(\hat{\boldsymbol{x}})\mathcal{Y}^\dagger_{\ell' jm}(\hat{\boldsymbol{y}})\end{pmatrix}\\
&=\frac{\delta(x-y)}{x^2}\,\delta(\hat{\boldsymbol{x}}-\hat{\boldsymbol{y}})=\delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y})
\end{aligned}
\tag{4.64}
$$

になる。$F_{\ell jm}$ の代わりに原点で発散する解 $\varPhi_{\ell jm}$ を用いても (4.63) は (4.64) を満たすが, この場合

$$
G(\boldsymbol{x}=0,\boldsymbol{y}:E)=\sum_{\ell jm}\frac{1}{W_{\ell j}}\varPhi_{\ell jm}(0)\tilde{U}_{\ell jm}(\boldsymbol{y})
$$

は発散する。一方, (4.52) で $\boldsymbol{x}=0$ とすると

$$
G(\boldsymbol{x}=0,\boldsymbol{y}:E)=\sum_{\alpha}\frac{\varphi_\alpha(0)\,\varphi^\dagger_\alpha(\boldsymbol{y})}{\omega_\alpha-E-i\varepsilon}
$$

固有状態 φ_α は原点で有界である。したがって, 原点で正則な解 $F_{\ell jm}$ を用いなければならない。一方, $U_{\ell jm}$ として $x\to\infty$ で e^{-ikx} になる解 $U^{(-)}_{\ell jm}$ を用いてもよいわけだが, 自由粒子の $G(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}:E)$ が $E>-M$ の場合

$$
G(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}:E)\xrightarrow{x\to\infty}\Big(E+h_0(\boldsymbol{x})\Big)\frac{e^{ikx}}{4\pi x}
$$

になるのと同様に, 外向き球面波 e^{ikx} になる解を用いなければならない。 ■

$G(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}:E)$ は

$$
G(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}:E)=\sum_\alpha\varphi_\alpha(\boldsymbol{x})\varphi^\dagger_\alpha(\boldsymbol{y})\left(\frac{\mathrm{P}}{\omega_\alpha-E}+i\pi\,\delta(\omega_\alpha-E)\right)
$$

であるが, デルタ関数の特異性は, ω_α が連続的固有値 ($\omega_\alpha>M$) ならば ω_α で積分するから G には現れない。しかし, 束縛状態である離散的固有値による特異性は G に現れる。(4.63) で E が離散的固有値 ω_α に一致する場合 $U_{\ell jm}=C\,F_{\ell jm}$ になるから $W_{\ell j}=0$ であり (4.63) は発散する。応答関数への束縛状態の寄与は Green 関数を用いずに

$$
\sum_{ph}\Big|\langle p|f(\boldsymbol{q})|h\rangle\Big|^2\delta(\omega_{ph}-q_0)\,,\quad p=\text{束縛された粒子状態}
$$

を直接求めればよいが, 準弾性散乱では連続状態の寄与に比べて重要ではないので無視する。

陽子の場合, $V_0(x)$ はクーロンポテンシャル $V_{\mathrm{C}}(x)$ を含む。x が十分大きいところでは

$$
V_{\mathrm{C}}(x)=\frac{Z\alpha}{x}\,,\qquad \alpha=\text{微細構造定数}
$$

であるが, これは x の関数として非常にゆっくり減少する。したがって, 外向き球面波の解を求めるとき, 自由粒子の波動関数 (4.62) ではなく, 純粋なクーロン波動関数を用いる必要があるかもしれない。

4.9　角度積分

縦方向応答関数の場合, (4.50) の Γ は (4.19) より

$$\Gamma_{\boldsymbol{q}} = \gamma^0 \Gamma^0 = F_1(q_\mu^2) + \frac{F_2(q_\mu^2)}{2M}\, \boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{\gamma}\,, \qquad \Gamma_{\boldsymbol{q}}^\dagger = \Gamma_{-\boldsymbol{q}} \tag{4.65}$$

である。また, 空孔状態 $\varphi_h(\boldsymbol{x})$ は

$$\varphi_h(\boldsymbol{x}) = \frac{1}{x}\begin{pmatrix} f_h(x)\,\mathcal{Y}_{\ell_h j_h m_h}(\hat{\boldsymbol{x}}) \\ i\,g_h(x)\,\mathcal{Y}_{\ell'_h j_h m_h}(\hat{\boldsymbol{x}}) \end{pmatrix}, \qquad f_h(x)\,,\ g_h(x) = \text{実関数}$$

とおける。(4.51) から

$$G_h(\Gamma_a, \Gamma_b : E, \boldsymbol{q}) = \sum_{m_h} \int d^3x\, d^3y\, \exp(-i\boldsymbol{q}\cdot(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}))\, \varphi_h^\dagger(\boldsymbol{x})\Gamma_a\, G(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} : E)\Gamma_b\, \varphi_h(\boldsymbol{y}) \tag{4.66}$$

とすると, 縦方向応答関数の場合

$$\Pi(q_0, q) = \sum_h \Big(G_h(\Gamma_{-\boldsymbol{q}}, \Gamma_{\boldsymbol{q}} : E_h + q_0, \boldsymbol{q}) + \Big(G_h(\Gamma_{\boldsymbol{q}}, \Gamma_{-\boldsymbol{q}} : E_h - q_0, -\boldsymbol{q}) \Big)^* \Big) \tag{4.67}$$

である (h の和は m_h 以外の量子数について行う)。(4.63) を使うと

$$\begin{aligned} G_h(\Gamma_a, \Gamma_b : E, \boldsymbol{q}) = \sum_{m_h \ell j m} \frac{1}{W_{\ell j}} & \int d^3x\, d^3y\, \exp(-i\boldsymbol{q}\cdot(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y})) \\ & \times \Big(\theta(x-y)\varphi_h^\dagger(\boldsymbol{x})\Gamma_a\, U_{\ell j m}(\boldsymbol{x})\, \tilde{F}_{\ell j m}(\boldsymbol{y})\Gamma_b\, \varphi_h(\boldsymbol{y}) \\ & \quad + \theta(y-x)\varphi_h^\dagger(\boldsymbol{x})\Gamma_a\, F_{\ell j m}(\boldsymbol{x})\, \tilde{U}_{\ell j m}(\boldsymbol{y})\Gamma_b\, \varphi_h(\boldsymbol{y}) \Big) \end{aligned}$$

になる。

$\boldsymbol{\sigma}^2$, σ_z の固有関数である 2 成分スピノールを χ_{m_s} とすると

$$\mathcal{Y}_{\ell j m} = \sum_{m_\ell m_s} \langle\, \ell\, m_\ell\ \tfrac{1}{2}\, m_s \,|\, j\, m\,\rangle\, Y_{\ell m_\ell} \chi_{m_s}$$

であるから

$$\begin{aligned} i\sigma_y \mathcal{Y}^*_{\ell j m} &= \sum \langle\, \ell\, m_\ell\ \tfrac{1}{2}\, m_s \,|\, j\, m\,\rangle\, Y^*_{\ell m_\ell} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \chi_{m_s} \\ &= \sum \langle\, \ell\, m_\ell\ \tfrac{1}{2}\, m_s \,|\, j\, m\,\rangle\, (-1)^{m_\ell} Y_{\ell\, -m_\ell} (-1)^{m_s+1/2} \chi_{-m_s} \\ &= \sum (-1)^{m+1/2} \langle\, \ell\ -m_\ell\ \tfrac{1}{2}\ -m_s \,|\, j\, m\,\rangle\, Y_{\ell m_\ell} \chi_{m_s} \\ &= \sum (-1)^{m+1/2} (-1)^{\ell+1/2-j} \langle\, \ell\, m_\ell\ \tfrac{1}{2}\, m_s \,|\, j\ -m\,\rangle\, Y_{\ell m_\ell} \chi_{m_s} \\ &= (-1)^{j+m-\ell}\mathcal{Y}_{\ell j\, -m} \end{aligned}$$

これから $U_{\ell j\, -m}$ の転置 $U^{\mathrm{t}}_{\ell j\, -m}$ は ($\sigma_y^{\mathrm{t}} = -\,\sigma_y$)

$$\begin{aligned} U^{\mathrm{t}}_{\ell j\, -m} &= \frac{1}{x}\Big(u_{\ell j} \mathcal{Y}^{\mathrm{t}}_{\ell j\, -m} \quad i\, v_{\ell j} \mathcal{Y}^{\mathrm{t}}_{\ell' j\, -m} \Big) \\ &= \frac{i\,(-1)^{j+m-\ell}}{x} \Big(u_{\ell j} \mathcal{Y}^\dagger_{\ell j m}\, \sigma_y^{\mathrm{t}} \quad -i\, v_{\ell j} \mathcal{Y}^\dagger_{\ell' j m}\, \sigma_y^{\mathrm{t}} \Big) = -\,i\,(-1)^{j+m-\ell} \tilde{U}_{\ell j m}\, \sigma_y \end{aligned} \tag{4.68}$$

$$\tilde{U}^{\mathrm{t}}_{\ell j\, -m} = i\,(-1)^{j+m-\ell} \sigma_y\, U_{\ell j m} \tag{4.69}$$

$F_{\ell jm}$, φ_h についても同じ関係式が成り立つ (φ_h の動径波動関数は実数であるから $\varphi_h^\dagger = \tilde{\varphi}_h$)。したがって, 例えば

$$\varphi_h^\dagger(\boldsymbol{x})\mathit{\Gamma}_a\, F_{\ell jm}(\boldsymbol{x}) = F_{\ell jm}^{\mathrm{t}}(\boldsymbol{x})\mathit{\Gamma}_a^{\mathrm{t}}\tilde{\varphi}_h^{\mathrm{t}} = (-1)^{j-m-\ell}(-1)^{j_h-m_h-\ell_h}\tilde{F}_{\ell j\,-m}\,\sigma_y\mathit{\Gamma}_a^{\mathrm{t}}\sigma_y\,\varphi_{\ell_h j_h\,-m_h}$$

になるから

$$\sum_{m_h m}\varphi_h^\dagger(\boldsymbol{x})\mathit{\Gamma}_a\, F_{\ell jm}(\boldsymbol{x})\,\tilde{U}_{\ell jm}(\boldsymbol{y})\mathit{\Gamma}_b\,\varphi_h(\boldsymbol{y}) = \sum_{m_h m}\tilde{F}_{\ell jm}(\boldsymbol{x})\,\overline{\mathit{\Gamma}}_a\,\varphi_h(\boldsymbol{x})\,\varphi_h^\dagger(\boldsymbol{y})\,\overline{\mathit{\Gamma}}_b\,U_{\ell jm}(\boldsymbol{y})$$

ただし

$$\overline{\mathit{\Gamma}} = \sigma_y\mathit{\Gamma}^{\mathrm{t}}\sigma_y = (\sigma_y\mathit{\Gamma}\sigma_y)^{\mathrm{t}}$$

と表せる。これから

$$\begin{aligned}G_h(\mathit{\Gamma}_a, \mathit{\Gamma}_b : E, \boldsymbol{q}) = \sum_{m_h\ell jm}&\frac{1}{W_{\ell j}}\int d^3x\, d^3y\,\theta(x-y)\\ &\times\Big(\exp(-i\boldsymbol{q}\cdot(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}))\,\varphi_h^\dagger(\boldsymbol{x})\mathit{\Gamma}_a\,U_{\ell jm}(\boldsymbol{x})\,\tilde{F}_{\ell jm}(\boldsymbol{y})\mathit{\Gamma}_b\,\varphi_h(\boldsymbol{y})\\ &\quad+\exp(i\boldsymbol{q}\cdot(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}))\,\varphi_h^\dagger(\boldsymbol{x})\overline{\mathit{\Gamma}}_b\,U_{\ell jm}(\boldsymbol{x})\,\tilde{F}_{\ell jm}(\boldsymbol{y})\overline{\mathit{\Gamma}}_a\,\varphi_h(\boldsymbol{y})\Big)\end{aligned}$$

になる。指数関数の展開式

$$\exp(i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{x}) = 4\pi\sum_{\lambda\mu} i^\lambda j_\lambda(qx)Y_{\lambda\mu}(\hat{\boldsymbol{q}})\,Y_{\lambda\mu}^*(\hat{\boldsymbol{x}})$$

を代入すると

$$\begin{aligned}&G_h(\mathit{\Gamma}_a, \mathit{\Gamma}_b : E, \boldsymbol{q})\\ &= \sum\frac{(4\pi)^2}{W_{\ell j}}\,i^{\lambda'-\lambda}Y_{\lambda\mu}(\hat{\boldsymbol{q}})\,Y_{\lambda'\mu'}(\hat{\boldsymbol{q}})\int dx\,dy\,\theta(x-y)\,j_\lambda(qx)\,j_{\lambda'}(qy)\\ &\times\Big(\int d\Omega_x\,Y_{\lambda\mu}^*(\hat{\boldsymbol{x}})x\varphi_h^\dagger(\boldsymbol{x})\mathit{\Gamma}_a\,xU_{\ell jm}(\boldsymbol{x})\int d\Omega_y\,Y_{\lambda'\mu'}^*(\hat{\boldsymbol{y}})y\tilde{F}_{\ell jm}(\boldsymbol{y})\mathit{\Gamma}_b\,y\varphi_h(\boldsymbol{y})\\ &+(-1)^{\lambda'-\lambda}\int d\Omega_x\,Y_{\lambda\mu}^*(\hat{\boldsymbol{x}})x\varphi_h^\dagger(\boldsymbol{x})\overline{\mathit{\Gamma}}_b\,xU_{\ell jm}(\boldsymbol{x})\int d\Omega_y\,Y_{\lambda'\mu'}^*(\hat{\boldsymbol{y}})y\tilde{F}_{\ell jm}(\boldsymbol{y})\overline{\mathit{\Gamma}}_a\,y\varphi_h(\boldsymbol{y})\Big)\end{aligned}\tag{4.70}$$

である ($d\Omega$ は角度についての積分)。

$$\mathit{\Gamma}_{\boldsymbol{q}} = F_1 - iq\frac{F_2}{2M}\mathit{\Sigma}_{\boldsymbol{q}}\,,\qquad \mathit{\Sigma}_{\boldsymbol{q}} = i\,\boldsymbol{\gamma}\cdot\hat{\boldsymbol{q}}\,,\quad \mathit{\Sigma}_{\boldsymbol{q}}^\dagger = \mathit{\Sigma}_{\boldsymbol{q}}$$

であるから, $\mathit{\Gamma}_a = 1$, $\mathit{\Gamma}_a = \mathit{\Sigma}_{\boldsymbol{q}}$ について角度積分を実行する。なお, 両者の場合 $\overline{\mathit{\Gamma}}_a = \mathit{\Gamma}_a$ であるから $\mathit{\Gamma}_a = \mathit{\Gamma}_b$ のとき

$$\begin{aligned}&G_h(\mathit{\Gamma}_a, \mathit{\Gamma}_a : E, \boldsymbol{q})\\ &= \sum\frac{(4\pi)^2}{W_{\ell j}}\,i^{\lambda'-\lambda}\Big(1+(-1)^{\lambda'-\lambda}\Big)Y_{\lambda\mu}(\hat{\boldsymbol{q}})\,Y_{\lambda'\mu'}(\hat{\boldsymbol{q}})\int dx\,dy\,\theta(x-y)\,j_\lambda(qx)\,j_{\lambda'}(qy)\\ &\times\int d\Omega_x\,Y_{\lambda\mu}^*(\hat{\boldsymbol{x}})x\varphi_h^\dagger(\boldsymbol{x})\mathit{\Gamma}_a\,xU_{\ell jm}(\boldsymbol{x})\int d\Omega_y\,Y_{\lambda'\mu'}^*(\hat{\boldsymbol{y}})y\tilde{F}_{\ell jm}(\boldsymbol{y})\mathit{\Gamma}_a\,y\varphi_h(\boldsymbol{y})\end{aligned}\tag{4.71}$$

になる。

$\boldsymbol{\Gamma_a = 1}$ の場合

$\mathcal{Y}_{\ell' jm} = -\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{x}}\,\mathcal{Y}_{\ell jm}$ であるから

$$\begin{aligned}\int d\Omega\, Y^*_{\lambda\mu}(\hat{\boldsymbol{x}})\, x\varphi^\dagger_h(\boldsymbol{x})\, xU_{\ell jm}(\boldsymbol{x}) &= \int d\Omega\, Y^*_{\lambda\mu}\Big(f_h\, u_{\ell j}\mathcal{Y}^\dagger_{\ell_h j_h m_h}\mathcal{Y}_{\ell jm} + g_h\, v_{\ell j}\mathcal{Y}^\dagger_{\ell'_h j_h m_h}\mathcal{Y}_{\ell' jm}\Big)\\ &= \Big(f_h\, u_{\ell j} + g_h\, v_{\ell j}\Big)\langle \ell_h j_h m_h|Y^*_{\lambda\mu}|\ell jm\rangle\end{aligned}$$

Bohr & Mottelson (3A–14) より

$$\begin{aligned}\langle \ell_h j_h m_h|Y^*_{\lambda\mu}|\ell jm\rangle &= \frac{(-1)^\mu}{\sqrt{2j_h+1}}\langle\, j\, m\ \lambda\ -\mu\,|\, j_h\, m_h\,\rangle\langle\, \ell_h j_h\,||\, Y_\lambda\,||\,\ell j\,\rangle\\ &= (-1)^{j_h-m_h-\lambda}\sqrt{\frac{2j+1}{4\pi}}\,\langle\, j\, m\ j_h\ -m_h\,|\,\lambda\,\mu\,\rangle\langle\, j\,\tfrac{1}{2}\ \lambda\, 0\,|\, j_h\,\tfrac{1}{2}\,\rangle\, P_{\ell+\lambda-\ell_h}\end{aligned}\tag{4.72}$$

ただし

$$P_n = \frac{1+(-1)^n}{2}$$

したがって

$$\begin{aligned}&\int d\Omega\, Y^*_{\lambda\mu}(\hat{\boldsymbol{x}})\, x\varphi^\dagger_h(\boldsymbol{x})\, xU_{\ell jm}(\boldsymbol{x})\\ &= \frac{(-1)^{j_h-m_h-\lambda}}{\sqrt{4\pi(2\lambda+1)}}\,\langle\, j\, m\ j_h\ -m_h\,|\,\lambda\,\mu\,\rangle\, P_{\ell+\lambda-\ell_h} D_{\rm out}(h,\ell j,\lambda : x)\end{aligned}\tag{4.73}$$

ただし

$$D_{\rm out}(h,\ell j,\lambda : x) = \sqrt{(2\lambda+1)(2j+1)}\,\langle\, j\,\tfrac{1}{2}\ \lambda\, 0\,|\, j_h\,\tfrac{1}{2}\,\rangle\Big(f_h(x)\, u_{\ell j}(x) + g_h(x)\, v_{\ell j}(x)\Big)\tag{4.74}$$

(4.68), (4.69) を使うと

$$\begin{aligned}\int d\Omega\, Y^*_{\lambda\mu}(\hat{\boldsymbol{x}})\, x\tilde{F}_{\ell jm}(\boldsymbol{x})\, x\varphi_h(\boldsymbol{x}) &= \int d\Omega\, Y^*_{\lambda\mu}(\hat{\boldsymbol{x}})\, x\varphi^{\rm t}_h(\boldsymbol{x})\, x\tilde{F}^{\rm t}_{\ell jm}(\boldsymbol{x})\\ &= (-1)^{j_h-m_h-\ell_h}(-1)^{j-m-\ell}\int d\Omega\, Y^*_{\lambda\mu}\, x\varphi^\dagger_{\ell_h j_h\, -m_h}\, xF_{\ell j\,-m}\end{aligned}$$

(4.73) で U を F で置き換えれば

$$\begin{aligned}&\int d\Omega\, Y^*_{\lambda\mu}(\hat{\boldsymbol{x}})\, x\tilde{F}_{\ell jm}(\boldsymbol{x})\, x\varphi_h(\boldsymbol{x})\\ &= \frac{(-1)^{j_h-m_h-\lambda-\mu}}{\sqrt{4\pi(2\lambda+1)}}\,\langle\, j\, m\ j_h\ -m_h\,|\,\lambda\ -\mu\,\rangle\, P_{\ell+\lambda-\ell_h} D_{\rm in}(h,\ell j,\lambda : x)\end{aligned}\tag{4.75}$$

ここで

$$D_{\rm in}(h,\ell j,\lambda : x) = \sqrt{(2\lambda+1)(2j+1)}\,\langle\, j\,\tfrac{1}{2}\ \lambda\, 0\,|\, j_h\,\tfrac{1}{2}\,\rangle\Big(f_h(x)\, f_{\ell j}(x) + g_h(x)\, g_{\ell j}(x)\Big)\tag{4.76}$$

なお, (4.75) を導くとき位相は

$$\begin{aligned}&(-1)^{j_h-m_h-\ell_h}(-1)^{j-m-\ell}(-1)^{j_h+m_h-\lambda}(-1)^{j+j_h-\lambda}\\ &= (-1)^{j_h-m_h-\ell_h}(-1)^{j-m-\ell+j_h+m_h-\lambda-(j+j_h-\lambda)} = (-1)^{j_h-m_h-\ell_h}(-1)^{m_h-m-\ell}\end{aligned}$$

であるが, $m_h - m = \mu$, $\ell+\lambda-\ell_h =$ 偶数 より $(-1)^{j_h-m_h-\lambda-\mu}$ になる。

$\boldsymbol{\Gamma_a = \Sigma_q}$ の場合

$$\Sigma_{\boldsymbol{q}} = i\,\boldsymbol{\gamma}\cdot\hat{\boldsymbol{q}} = \begin{pmatrix} 0 & i\,\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{q}} \\ -\,i\,\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{q}} & 0 \end{pmatrix}, \qquad \mathcal{Y}_{\ell' jm} = -\,\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{x}}\mathcal{Y}_{\ell jm}$$

であるから

$$\int d\Omega_x\, Y^*_{\lambda\mu}(\hat{\boldsymbol{x}})x\varphi^\dagger_h(\boldsymbol{x})\Sigma_{\boldsymbol{q}}\, xU_{\ell jm}(\boldsymbol{x}) = f_h v_{\ell j}\, A^{(+)} + g_h u_{\ell j}\, A^{(-)} \tag{4.77}$$

ここで

$$\begin{aligned} A^{(\pm)} &= \langle l_h j_h m_h | Y^*_{\lambda\mu} \left\{ \begin{array}{c} \boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{q}}\,\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{x}} \\ \boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{x}}\,\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{q}} \end{array} \right\} |\ell jm\rangle \\ &= \sum_{LJM} \langle l_h j_h m_h | Y^*_{\lambda\mu} | LJM\rangle\langle LJM| \left\{ \begin{array}{c} \boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{q}}\,\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{x}} \\ \boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{x}}\,\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{q}} \end{array} \right\} |\ell jm\rangle \end{aligned}$$

である。$\langle l_h j_h m_h | Y^*_{\lambda\mu} | LJM\rangle$ は (4.72) から求まる。ベクトル $\boldsymbol{a}$ の球成分を

$$a_{\pm 1} = \mp\, \frac{a_x \pm i a_y}{\sqrt{2}}\,, \qquad a_0 = a_z$$

とすると

$$a_\nu = \sqrt{4\pi/3}\,|\boldsymbol{a}|\,Y_{1\nu}(\boldsymbol{a})\,, \qquad \boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b} = \sum_\nu a^*_\nu b_\nu\,, \qquad (\boldsymbol{a}\times\boldsymbol{b})_\nu = -\,i\sqrt{2}\,(ab)_{(11)1\nu}$$

であるから

$$\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{q}}\,\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{x}} = \hat{\boldsymbol{q}}\cdot\hat{\boldsymbol{x}} + i\hat{\boldsymbol{q}}\cdot(\hat{\boldsymbol{x}}\times\boldsymbol{\sigma}) = \frac{4\pi}{3}\sum_\nu Y^*_{1\nu}(\hat{\boldsymbol{q}})\left(Y_{1\nu}(\hat{\boldsymbol{x}}) + \sqrt{2}\,(Y_1(\hat{\boldsymbol{x}})\,\sigma)_{(11)1\nu}\right)$$

になる。Bohr & Mottelson (3A–14), (3A–22) を使うと

$$\begin{aligned} &\langle LJM| \left\{ \begin{array}{c} \boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{q}}\,\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{x}} \\ \boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{x}}\,\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{q}} \end{array} \right\} |\ell jm\rangle \\ &= \frac{4\pi}{3}\sum_\nu Y^*_{1\nu}(\hat{\boldsymbol{q}})\frac{\langle\, j\,m\;1\,\nu\,|\,J\,M\,\rangle}{\sqrt{2J+1}}\left(\langle\, LJ\,||\,Y_1\,||\,\ell j\,\rangle \pm \sqrt{2}\,\langle\, LJ\,||\;(Y_1\sigma)_{(11)1}\,||\,\ell j\,\rangle\right) \\ &= \sqrt{\frac{4\pi}{3}\frac{2j+1}{2J+1}}P_{\ell+1-L}\,B^{(\pm)}_{\ell jJ}\sum_\nu \langle\, 1\,\nu\;j\,m\,|\,J\,M\,\rangle\,Y^*_{1\nu}(\hat{\boldsymbol{q}}) \end{aligned}$$

ただし

$$B^{(\pm)}_{\ell jJ} = \langle\, j\,\tfrac{1}{2}\;1\,0\,|\,J\,\tfrac{1}{2}\,\rangle \pm (-1)^{j+\ell-1/2}\sqrt{2}\,\langle\, j\;-\tfrac{1}{2}\;1\,1\,|\,J\,\tfrac{1}{2}\,\rangle$$

これから

$$\begin{aligned} A^{(\pm)} = \sum_{JM\nu}\sqrt{\frac{2j+1}{3}}\,&(-1)^{j_h - m_h - \lambda}P_{\ell+\ell_h+\lambda+1}\,\langle\, J\,\tfrac{1}{2}\;\lambda\,0\,|\,j_h\,\tfrac{1}{2}\,\rangle\,B^{(\pm)}_{\ell jJ} \\ &\times\langle\, 1\,\nu\;j\,m\,|\,J\,M\,\rangle\,\langle\, J\,M\;j_h\;-m_h\,|\,\lambda\,\mu\,\rangle\,Y^*_{1\nu}(\hat{\boldsymbol{q}}) \end{aligned}$$

CG 係数を組み替えて $\langle\, j\,m\;j_h\;-m_h\,|\,\cdots\,\rangle$ になるようにする。そこで

$$\begin{aligned} &\sum_{m_e}\langle\, a\,m_a\;b\,m_b\,|\,e\,m_e\,\rangle\,\langle\, e\,m_e\;d\,m_d\,|\,c\,m_c\,\rangle \\ &= \sum_{fm_f}\sqrt{(2e+1)(2f+1)}\,\langle\, b\,m_b\;d\,m_d\,|\,f\,m_f\,\rangle\,\langle\, a\,m_a\;f\,m_f\,|\,c\,m_c\,\rangle\,W(abcd;ef) \end{aligned} \tag{4.78}$$

であるラカー係数 W を使うと (Rose (6.4b), あるいは Edomonds (6.2.6))

$$
\begin{aligned}
&\sum_{M} \langle\, 1\,\nu\ j\,m \,|\, J\,M \,\rangle \,\langle\, J\,M\ j_h\ -m_h \,|\, \lambda\,\mu \,\rangle \\
&= \sum_{IM_I} \sqrt{(2J+1)(2I+1)}\ \langle\, j\,m\ j_h\ -m_h \,|\, I\,M_I \,\rangle \,\langle\, 1\,\nu\ I\,M_I \,|\, \lambda\,\mu \,\rangle\, W(1j\lambda j_h; JI)
\end{aligned}
$$

になるから

$$
A^{(\pm)} = \sum_{IM_I\nu} \frac{(-1)^{j_h-m_h-\lambda}}{\sqrt{3(2\lambda+1)}}\, P_{\ell+\ell_h+\lambda+1}\, C^{(\pm)}_{h\ell j\lambda I} \langle\, j\,m\ j_h\ -m_h \,|\, I\,M_I \,\rangle \,\langle\, 1\,\nu\ I\,M_I \,|\, \lambda\,\mu \,\rangle\, Y^*_{1\nu}(\hat{\boldsymbol{q}}) \tag{4.79}
$$

ただし

$$
\begin{aligned}
C^{(\pm)}_{h\ell j\lambda I} &= \sum_{J} \sqrt{(2\lambda+1)(2j+1)(2J+1)(2I+1)}\,\langle\, J\,\tfrac{1}{2}\ \lambda\,0 \,|\, j_h\,\tfrac{1}{2} \,\rangle\, B^{(+)}_{\ell jJ}\, W(1j\lambda j_h; JI) \\
&= \sum_{J} \sqrt{(2\lambda+1)(2j+1)(2J+1)(2I+1)} \\
&\quad W(1j\lambda j_h; JI) \langle\, J\,\tfrac{1}{2}\ \lambda\,0 \,|\, j_h\,\tfrac{1}{2} \,\rangle \Big(\langle\, j\,\tfrac{1}{2}\ 1\,0 \,|\, J\,\tfrac{1}{2} \,\rangle \pm (-1)^{j+\ell-1/2}\sqrt{2}\,\langle\, j\ -\tfrac{1}{2}\ 1\,1 \,|\, J\,\tfrac{1}{2} \,\rangle \Big)
\end{aligned} \tag{4.80}
$$

である。(4.79) を (4.77) に代入すると

$$
\begin{aligned}
&\int d\Omega\, Y^*_{\lambda\mu}(\hat{\boldsymbol{x}}) x \varphi^\dagger_h(\boldsymbol{x}) \Sigma_{\boldsymbol{q}}\, x U_{\ell jm}(\boldsymbol{x}) \\
&= \sum_{IM\nu} \frac{(-1)^{j_h-m_h-\lambda}}{\sqrt{3(2\lambda+1)}}\, \langle\, j\,m\ j_h\ -m_h \,|\, I\,M \,\rangle \langle\, 1\,\nu\ I\,M \,|\, \lambda\,\mu \,\rangle\, Y^*_{1\nu}(\hat{\boldsymbol{q}})\, S_{\rm out}(h, \ell j, \lambda, I : x)
\end{aligned} \tag{4.81}
$$

ただし

$$
S_{\rm out}(h, \ell j, \lambda, I : x) = C^{(+)}_{h\ell j\lambda I}\, f_h(x) v_{\ell j}(x) + C^{(-)}_{h\ell j\lambda I}\, g_h(x) u_{\ell j}(x) \tag{4.82}
$$

$$
S_{\rm in}(h, \ell j, \lambda, I : x) = C^{(+)}_{h\ell j\lambda I}\, f_h(x) g_{\ell j}(x) + C^{(-)}_{h\ell j\lambda I}\, g_h(x) f_{\ell j}(x) \tag{4.83}
$$

である。一方

$$
\begin{aligned}
&\int d\Omega\, Y^*_{\lambda\mu}(\hat{\boldsymbol{x}})\, x \tilde{F}_{\ell jm}(\boldsymbol{x}) \Sigma_q\, x \varphi_h(\boldsymbol{x}) \\
&= (-1)^{j_h-m_h-\ell_h} (-1)^{j-m-\ell} \int d\Omega\, Y^*_{\lambda\mu}(\hat{\boldsymbol{x}})\, x \varphi^\dagger_{\ell_h j_h\, -m_h}(\boldsymbol{x}) \overline{\Sigma}_q\, x F_{\ell j\, -m}(\boldsymbol{x}) \\
&= -\sum_{IM\nu} \frac{(-1)^{j_h-m_h+I+M}}{\sqrt{3(2\lambda+1)}}\, \langle\, j\,m\ j_h\ -m_h \,|\, I\ -M \,\rangle \langle\, 1\,\nu\ I\,M \,|\, \lambda\,\mu \,\rangle\, Y^*_{1\nu}(\hat{\boldsymbol{q}}) \\
&\qquad P_{\ell+\ell_h+\lambda+1}\, S_{\rm in}(h, \ell j, \lambda, I : x)
\end{aligned} \tag{4.84}
$$

$G^{11}_h(E, q) = G_h(1, 1 : E, q)$

(4.71), (4.73), (4.75) より

$$
\begin{aligned}
G^{11}_h(E, \boldsymbol{q}) &= \sum \frac{(4\pi)^2}{W_{\ell j}}\, i^{\lambda'-\lambda} \Big(1 + (-1)^{\lambda'-\lambda}\Big) Y_{\lambda\mu}(\hat{\boldsymbol{q}})\, Y_{\lambda'\mu'}(\hat{\boldsymbol{q}}) \int dx\, dy\, \theta(x-y)\, j_\lambda(qx)\, j_{\lambda'}(qy) \\
&\quad \times \frac{(-1)^{j_h-m_h-\lambda}}{\sqrt{4\pi(2\lambda+1)}}\, \langle\, j\,m\ j_h\ -m_h \,|\, \lambda\,\mu \,\rangle\, P_{\ell+\lambda-\ell_h} D_{\rm out}(h, \ell j, \lambda : x) \\
&\quad \times \frac{(-1)^{j_h-m_h-\lambda'-\mu'}}{\sqrt{4\pi(2\lambda'+1)}}\, \langle\, j\,m\ j_h\ -m_h \,|\, \lambda'\ -\mu' \,\rangle\, P_{\ell+\lambda'-\ell_h} D_{\rm in}(h, \ell j, \lambda' : y)
\end{aligned}
$$

である。

$$\sum_{mm_h}\langle\, j\, m\ j_h\ -m_h\,|\,\lambda\,\mu\,\rangle\langle\, j\, m\ j_h\ -m_h\,|\,\lambda'\ -\mu'\,\rangle = \delta_{\lambda\lambda'}\,\delta_{\mu\,-\mu'}$$

であるから

$$G_h^{11}(E,\boldsymbol{q}) = 2\sum\frac{P_{\ell+\lambda-\ell_h}}{W_{\ell j}}\frac{4\pi}{2\lambda+1}(-1)^{\mu}Y_{\lambda\mu}(\hat{\boldsymbol{q}})\,Y_{\lambda\,-\mu}(\hat{\boldsymbol{q}})$$
$$\times\int dx\,dy\,\theta(x-y)\,j_\lambda(qx)\,j_\lambda(qy)D_{\mathrm{out}}(h,\ell j,\lambda:x)\,D_{\mathrm{in}}(h,\ell j,\lambda:y)$$

更に

$$\sum_{\mu}(-1)^{\mu}Y_{\lambda\mu}(\hat{\boldsymbol{q}})\,Y_{\lambda\,-\mu}(\hat{\boldsymbol{q}}) = \frac{2\lambda+1}{4\pi}$$

より

$$G_h^{11}(E,\boldsymbol{q}) = 2\sum_{\ell j\lambda}\frac{P_{\ell+\lambda-\ell_h}}{W_{\ell j}}\int dx\,dy\,\theta(x-y)\,j_\lambda(qx)\,j_\lambda(qy)\,D_{\mathrm{out}}(h,\ell j,\lambda:x)\,D_{\mathrm{in}}(h,\ell j,\lambda:y)$$

$\boldsymbol{G_h^{\sigma\sigma}(E,q) = G_h(\Sigma_q,\Sigma_q:E,q)}$

$$G_h^{\sigma\sigma}(E,\boldsymbol{q}) = -\sum\frac{(4\pi)^2}{W_{\ell j}}i^{\lambda'-\lambda}\frac{1+(-1)^{\lambda'-\lambda}}{3\sqrt{(2\lambda+1)(2\lambda'+1)}}P_{\ell+\ell_h+\lambda+1}P_{\ell+\ell_h+\lambda'+1}$$
$$\times(-1)^{I'+M'-\lambda}\langle\, j\, m\ j_h\ -m_h\,|\,I\,M\,\rangle\,\langle\, j\, m\ j_h\ -m_h\,|\,I'\ -M'\,\rangle$$
$$\times\langle\,1\,\nu\ I\,M\,|\,\lambda\,\mu\,\rangle\,\langle\,1\,\nu'\ I'\,M'\,|\,\lambda'\,\mu'\,\rangle\,Y_{\lambda\mu}\,Y_{\lambda'\mu'}Y_{1\nu}^*\,Y_{1\nu'}^*$$
$$\times\int dx\,dy\,\theta(x-y)\,j_\lambda(qx)\,j_{\lambda'}(qy)\,S_{\mathrm{out}}(h,\ell j,\lambda,I:x)\,S_{\mathrm{in}}(h,\ell j,\lambda',I':y)$$

m, m_h について和をとれば $I'=I$, $M'=-M$ になるから

$$G_h^{\sigma\sigma}(E,\boldsymbol{q}) = -\sum\frac{(4\pi)^2}{W_{\ell j}}i^{\lambda'-\lambda}\frac{1+(-1)^{\lambda'-\lambda}}{3\sqrt{(2\lambda+1)(2\lambda'+1)}}P_{\ell+\ell_h+\lambda+1}P_{\ell+\ell_h+\lambda'+1}$$
$$\times(-1)^{I-M-\lambda}\langle\,1\,\nu\ I\,M\,|\,\lambda\,\mu\,\rangle\,\langle\,1\,\nu'\ I\ -M\,|\,\lambda'\,\mu'\,\rangle\,Y_{1\nu}^*\,Y_{\lambda\mu}\,Y_{1\nu'}^*\,Y_{\lambda'\mu'}$$
$$\times\int dx\,dy\,\theta(x-y)\,j_\lambda(qx)\,j_{\lambda'}(qy)\,S_{\mathrm{out}}(h,\ell j,\lambda,I:x)\,S_{\mathrm{in}}(h,\ell j,\lambda',I:y)$$

ここで

$$\sum_{m_1m_2}\langle\,\ell_1\,m_1\ \ell_2\,m_2\,|\,\ell\,m\,\rangle\,Y_{\ell_1m_1}(\hat{\boldsymbol{q}})\,Y_{\ell_2m_2}(\hat{\boldsymbol{q}}) = \sqrt{\frac{(2\ell_1+1)(2\ell_2+1)}{4\pi(2\ell+1)}}\,\langle\,\ell_1\,0\ \ell_2\,0\,|\,\ell\,0\rangle Y_{\ell m}(\hat{\boldsymbol{q}})$$

を使うと

$$\sum_{\mu\nu}\langle\,1\,\nu\ I\,M\,|\,\lambda\,\mu\,\rangle\,Y_{1\nu}^*\,Y_{\lambda\mu} = (-1)^{\lambda-I}\sqrt{\frac{2\lambda+1}{2I+1}}\,\sum_{\mu\nu}\langle\,1\ -\nu\ \lambda\,\mu\,|\,I\,M\,\rangle\,Y_{1\,-\nu}\,Y_{\lambda\mu}$$
$$= (-1)^{\lambda-I}\sqrt{\frac{3}{4\pi}\,\frac{2\lambda+1}{2I+1}}\langle\,1\,0\ \lambda\,0\,|\,I\,0\,\rangle\,Y_{IM}$$
$$= -(-1)^{\lambda-I}\sqrt{\frac{3}{4\pi}\frac{2\lambda+1}{2I+1}}\langle\,I\,0\ 1\,0\,|\,\lambda\,0\,\rangle\,Y_{IM}$$

$$\sum_{\mu'\nu'}\langle\,1\,\nu'\ I\ -M\,|\,\lambda'\,\mu'\,\rangle\,Y_{1\nu'}^*\,Y_{\lambda'\mu'} = -(-1)^{\lambda'-I}\sqrt{\frac{3}{4\pi}\frac{2\lambda'+1}{2I+1}}\langle\,I\,0\ 1\,0\,|\,\lambda'\,0\,\rangle\,Y_{I\,-M}$$

になるから

$$G_h^{\sigma\sigma}(E,\boldsymbol{q}) = -\sum \frac{i^{\lambda'-\lambda}}{W_{\ell j}}\Big(1+(-1)^{\lambda'-\lambda}\Big)P_{\ell+\ell_h+\lambda+1}P_{\ell+\ell_h+\lambda'+1}\langle\, I\,0\;1\,0\,|\,\lambda\,0\,\rangle\langle\, I\,0\;1\,0\,|\,\lambda'\,0\,\rangle$$
$$(-1)^{I-\lambda}\int dx\,dy\,\theta(x-y)\,j_\lambda(qx)\,j_{\lambda'}(qy)\,S_{\rm out}(h,\ell j,\lambda,I:x)\,S_{\rm in}(h,\ell j,\lambda',I:y)$$

CG 係数より λ, $\lambda' = I\pm 1$ になるから $\lambda'-\lambda$ は偶数である。

$$i^{I-\lambda+1}\,i^{I-\lambda'+1} = i^{2I+2-2\lambda+\lambda-\lambda'} = -\,(-1)^{I-\lambda}i^{\lambda'-\lambda}$$

であるから

$$J_\alpha(h,\ell j,I:x) = \sum_{\lambda=I\pm1} i^{I-\lambda+1}\langle\, I\,0\;1\,0\,|\,\lambda\,0\,\rangle j_\lambda(qx)\,S_\alpha(h,\ell j,\lambda,I:x)\,,\quad \alpha=\mathrm{out}\,,\ \mathrm{in} \tag{4.85}$$

とおくと

$$G_h^{\sigma\sigma}(E,\boldsymbol{q}) = 2\sum\frac{P_{\ell+\ell_h+\lambda}}{W_{\ell j}}\int dx\,dy\,\theta(x-y)\,J_{\rm out}(h,\ell j,\lambda:x)\,J_{\rm in}(h,\ell j,\lambda:y)$$

である。

$\boldsymbol{G_h^{1\sigma}(E,q) = G_h(1,\Sigma_q:E,q)}$

$G_h^{\sigma\sigma}$ と同様に行えば

$$\begin{aligned}
G_h^{1\sigma}(E,\boldsymbol{q}) &= \sum\frac{(4\pi)^2}{W_{\ell j}}\,i^{\lambda'-\lambda}Y_{\lambda\mu}(\hat{\boldsymbol{q}})\,Y_{\lambda'\mu'}(\hat{\boldsymbol{q}})\int dx\,dy\,\theta(x-y)\,j_\lambda(qx)\,j_{\lambda'}(qy)\\
&\quad\times\Bigg(\int d\Omega_x\,Y^*_{\lambda\mu}(\hat{\boldsymbol{x}})x\varphi_h^\dagger(\boldsymbol{x})\,xU_{\ell jm}(\boldsymbol{x})\int d\Omega_y\,Y^*_{\lambda'\mu'}(\hat{\boldsymbol{y}})y\tilde{F}_{\ell jm}(\boldsymbol{y})\Sigma_q\,y\varphi_h(\boldsymbol{y})\\
&\qquad+(-1)^{\lambda'-\lambda}\int d\Omega_x\,Y^*_{\lambda\mu}(\hat{\boldsymbol{x}})x\varphi_h^\dagger(\boldsymbol{x})\Sigma_q\,xU_{\ell jm}(\boldsymbol{x})\int d\Omega_y\,Y^*_{\lambda'\mu'}(\hat{\boldsymbol{y}})y\tilde{F}_{\ell jm}(\boldsymbol{y})\,y\varphi_h(\boldsymbol{y})\Bigg)\\
&= \sum\frac{P_{\ell+\ell_h+\lambda}}{W_{\ell j}}\int dx\,dy\,\theta(x-y)\\
&\quad\times\Big(j_\lambda(qx)D_{\rm out}(h,\ell j,\lambda:x)\,i^{\lambda-\lambda'}\langle\,\lambda 0\;1 0\,|\,\lambda' 0\,\rangle j_{\lambda'}(qy)S_{\rm in}(h,\ell j,\lambda',\lambda:y)\\
&\quad+j_\lambda(qy)D_{\rm in}(h,\ell j,\lambda:y)\,i^{\lambda-\lambda'}\langle\,\lambda 0\;1 0\,|\,\lambda' 0\,\rangle j_{\lambda'}(qx)S_{\rm out}(h,\ell j,\lambda',\lambda:x)\Big)\\
&= -\,i\sum\frac{P_{\ell+\ell_h+\lambda}}{W_{\ell j}}\int dx\,dy\,\theta(x-y)\Big(j_\lambda(qx)D_{\rm out}(h,\ell j,\lambda:x)\,J_{\rm in}(h,\ell j,\lambda:y)\\
&\qquad\qquad+j_\lambda(qy)D_{\rm in}(h,\ell j,\lambda:y)\,J_{\rm out}(h,\ell j,\lambda:x)\Big)
\end{aligned}$$

一方

$$\begin{aligned}
G_h(\Sigma_q,1:E,\boldsymbol{q}) &= \sum\frac{(4\pi)^2}{W_{\ell j}}\,i^{\lambda'-\lambda}Y_{\lambda\mu}(\hat{\boldsymbol{q}})\,Y_{\lambda'\mu'}(\hat{\boldsymbol{q}})\int dx\,dy\,\theta(x-y)\,j_\lambda(qx)\,j_{\lambda'}(qy)\\
&\quad\times(-1)^{\lambda'-\lambda}\Bigg(\int d\Omega_x\,Y^*_{\lambda\mu}(\hat{\boldsymbol{x}})x\varphi_h^\dagger(\boldsymbol{x})\,xU_{\ell jm}(\boldsymbol{x})\int d\Omega_y\,Y^*_{\lambda'\mu'}(\hat{\boldsymbol{y}})y\tilde{F}_{\ell jm}(\boldsymbol{y})\Sigma_q\,y\varphi_h(\boldsymbol{y})\\
&\quad+(-1)^{\lambda'-\lambda}\int d\Omega_x\,Y^*_{\lambda\mu}(\hat{\boldsymbol{x}})x\varphi_h^\dagger(\boldsymbol{x})\Sigma_q\,xU_{\ell jm}(\boldsymbol{x})\int d\Omega_y\,Y^*_{\lambda'\mu'}(\hat{\boldsymbol{y}})y\tilde{F}_{\ell jm}(\boldsymbol{y})\,y\varphi_h(\boldsymbol{y})\Bigg)
\end{aligned}$$

$\langle\,\lambda 0\;1 0\,|\,\lambda' 0\,\rangle$ より $\lambda'-\lambda=\pm 1$ であるから

$$G_h(\Sigma_q,1:E,\boldsymbol{q}) = -\,G_h(1,\Sigma_q:E,\boldsymbol{q})$$

になる。

4.10　相関関数の動径積分

(4.65) で定義した $\mathit{\Gamma}_{\boldsymbol{q}}$ は $\mathit{\Gamma}_{\boldsymbol{q}} = F_1(q_\mu^2) - iq\dfrac{F_2(q_\mu^2)}{2M}\,\mathit{\Sigma}_{\boldsymbol{q}}$ であるから

$$
\begin{aligned}
G_h(E,\boldsymbol{q}) &= G_h(\mathit{\Gamma}_{-\boldsymbol{q}},\mathit{\Gamma}_{\boldsymbol{q}} : E,\boldsymbol{q}) \\
&= F_1^2\,G_h^{11} - 2iqF_1\frac{F_2}{2M}G_h^{1\sigma} + q^2\left(\frac{F_2}{2M}\right)^2 G_h^{\sigma\sigma} \\
&= 2\sum\frac{P_{\ell+\ell_h+\lambda}}{W_{\ell j}}\int dx\,dy\,\theta(x-y)\Big[\,F_1^2 j_\lambda(qx)D_{\rm out}(x)\,j_\lambda(qy)D_{\rm in}(y) \\
&\qquad - qF_1\frac{F_2}{2M}\Big(j_\lambda(qx)D_{\rm out}(x)\,J_{\rm in}(y) + j_\lambda(qy)D_{\rm in}(y)\,J_{\rm out}(x)\Big) \\
&\qquad + q^2\left(\frac{F_2}{2M}\right)^2 J_{\rm out}(x)J_{\rm in}(y)\,\Big] \\
&= 2\sum\frac{P_{\ell+\ell_h+\lambda}}{W_{\ell j}}\int dx\,dy\,\theta(x-y)\,K_{\rm out}(h,\ell j,\lambda:x)\,K_{\rm in}(h,\ell j,\lambda:y)
\end{aligned} \tag{4.86}
$$

ただし

$$
K_\alpha(h,\ell j,\lambda:x) = F_1 j_\lambda(qx)D_\alpha(h,\ell j,\lambda:x) - q\frac{F_2}{2M}\,J_\alpha(h,\ell j,\lambda:x)\,,\quad \alpha = {\rm out}\,,\ {\rm in} \tag{4.87}
$$

である。$G_h(\mathit{\Gamma}_{-\boldsymbol{q}},\mathit{\Gamma}_{\boldsymbol{q}} : E,\boldsymbol{q})$ は $\boldsymbol{q}$ の向きに依存しないから

$$
G_h(\mathit{\Gamma}_{\boldsymbol{q}},\mathit{\Gamma}_{-\boldsymbol{q}} : E,-\boldsymbol{q}) = G_h(\mathit{\Gamma}_{-\boldsymbol{q}},\mathit{\Gamma}_{\boldsymbol{q}} : E,\boldsymbol{q}) = G_h(E,\boldsymbol{q})
$$

である。したがって, (4.67) より

$$
\mathit{\Pi}(q_0,q) = \sum_h\Big(G_h(E_h+q_0,\boldsymbol{q}) + G_h^*(E_h-q_0,\boldsymbol{q})\Big) \tag{4.88}
$$

結局, (4.86) の 2 重積分を実行することになる。

$K_\alpha(h,\ell j,\lambda:x)$ の具体形を求める。(4.80), (4.82), (4.85) から

$$
\begin{aligned}
J_{\rm out}(h,\ell j,\lambda:x) = \sum_{\lambda'=\lambda\pm1} & i^{\lambda-\lambda'+1}\langle\,\lambda\,0\;1\,0\,|\,\lambda'\,0\,\rangle\,j_{\lambda'}(qx) \\
&\times\Big(C^{(+)}_{h\ell j\lambda'\lambda}\,f_h(x)v_{\ell j}(x) + C^{(-)}_{h\ell j\lambda'\lambda}\,g_h(x)u_{\ell j}(x)\Big)
\end{aligned}
$$

ただし (4.80) より

$$
\begin{aligned}
C^{(\pm)}_{h\ell j\lambda'\lambda} = \sum_J & \sqrt{(2\lambda'+1)(2\lambda+1)(2j+1)(2J+1)}\,W(1j\lambda' j_h;J\lambda)\langle\,J\,\tfrac12\;\lambda'\,0\,|\,j_h\,\tfrac12\,\rangle \\
&\times\Big(\langle\,j\,\tfrac12\;1\,0\,|\,J\,\tfrac12\,\rangle \pm (-1)^{j+\ell-1/2}\sqrt{2}\,\langle\,j\;-\tfrac12\;1\,1\,|\,J\,\tfrac12\,\rangle\Big)
\end{aligned}
$$

ここで

$$
a=\lambda'\,,\quad b=1\,,\quad c=j_h\,,\quad d=j\,,\quad e=\lambda\,,\quad f=J
$$

とすると

$$
\begin{aligned}
C^{(\pm)}_{h\ell j\lambda'\lambda} &= \sum_f\sqrt{(2a+1)(2d+1)(2e+1)(2f+1)}\,W(bdac;fe) \\
&\qquad\times\langle\,f\,\tfrac12\;a\,0\,|\,c\,\tfrac12\,\rangle\Big(\langle\,d\,\tfrac12\;b\,0\,|\,f\,\tfrac12\,\rangle \pm (-1)^{d+\ell-1/2}\sqrt{2}\,\langle\,d\;-\tfrac12\;b\,1\,|\,f\,\tfrac12\,\rangle\Big) \\
&= (-1)^{a+b+d-c}\sqrt{(2a+1)(2d+1)}\,\sum_f\sqrt{(2e+1)(2f+1)}\,W(abcd;ef) \\
&\qquad\times\langle\,a\,0\;f\,\tfrac12\,|\,c\,\tfrac12\,\rangle\Big(\langle\,b\,0\;d\,\tfrac12\,|\,f\,\tfrac12\,\rangle \pm (-1)^{d+\ell-1/2}\sqrt{2}\,\langle\,b\,1\;d\;-\tfrac12\,|\,f\,\tfrac12\,\rangle\Big)
\end{aligned}
$$

(4.78) より

$$C^{(\pm)}_{h\ell j\lambda'\lambda} = (-1)^{a+b+d-c}\sqrt{(2a+1)(2d+1)}$$
$$\Big(\langle\, a\,0\ b\,0\,|\,e\,0\,\rangle\,\langle\, e\,0\ d\,\tfrac{1}{2}\,|\,c\,\tfrac{1}{2}\,\rangle \pm (-1)^{d+\ell-1/2}\sqrt{2}\,\langle\, a\,0\ b\,1\,|\,e\,1\,\rangle\,\langle\, e\,1\ d\ -\tfrac{1}{2}\,|\,c\,\tfrac{1}{2}\,\rangle\Big)$$
$$= (-1)^{\lambda'+1+j-j_h}\sqrt{(2\lambda'+1)(2j+1)}$$
$$\Big(\langle\,\lambda'\,0\ 1\,0\,|\,\lambda\,0\rangle\langle\,\lambda\,0\ j\,\tfrac{1}{2}\,|\,j_h\,\tfrac{1}{2}\,\rangle \pm (-1)^{j+\ell-1/2}\sqrt{2}\,\langle\,\lambda'\,0\ 1\,1\,|\,\lambda\,1\rangle\langle\,\lambda\,1\ j\ -\tfrac{1}{2}\,|\,j_h\,\tfrac{1}{2}\,\rangle\Big)$$
$$= (-1)^{\lambda'-\lambda+1}\sqrt{(2\lambda+1)(2j+1)}$$
$$\Big(-\langle\,\lambda\,0\ 1\,0\,|\,\lambda'\,0\rangle\langle\, j\,\tfrac{1}{2}\ \lambda\,0\,|\,j_h\,\tfrac{1}{2}\,\rangle \pm (-1)^{j+\ell-1/2}\sqrt{2}\,\langle\,\lambda\ -1\ 1\,1\,|\,\lambda'\,0\rangle\langle\, j\ -\tfrac{1}{2}\ \lambda\,1\,|\,j_h\,\tfrac{1}{2}\,\rangle\Big)$$

$\lambda' = \lambda \pm 1$ より $(-1)^{\lambda'-\lambda+1} = 1$ である。Bohr & Mottelson (3A–23) を使うと

$$C^{(\pm)}_{h\ell j\lambda'\lambda} = -\sqrt{(2\lambda+1)(2j+1)}\,\langle\, j\,\tfrac{1}{2}\ \lambda\,0\,|\,j_h\,\tfrac{1}{2}\,\rangle$$
$$\left(\langle\,\lambda\,0\ 1\,0\,|\,\lambda'\,0\,\rangle \pm \sqrt{\frac{2}{\lambda(\lambda+1)}}\,\langle\,\lambda\ -1\ 1\,1\,|\,\lambda'\,0\,\rangle\Big((-1)^{\ell+\ell_h+\lambda}\kappa_h - \kappa_{\ell j}\Big)\right)$$

ここで κ は (4.58) で定義したものである。$\ell+\ell_h+\lambda =$ 偶数 の場合だけ考えるから $(-1)^{\ell+\ell_h+\lambda} = 1$ である。したがって

$$J_{\rm out}(h,\ell j,\lambda:x) = \sqrt{(2\lambda+1)(2j+1)}\,\langle\, j\,\tfrac{1}{2}\ \lambda\,0\,|\,j_h\,\tfrac{1}{2}\,\rangle$$
$$\times\Big(d^{(+)}(x)\,f_h(x)v_{\ell j}(x) + d^{(-)}(x)\,g_h(x)u_{\ell j}(x)\Big) \tag{4.89}$$

ただし

$$d^{(\pm)}(x) = -\sum_{\lambda'} i^{\lambda-\lambda'+1}\langle\,\lambda\,0\ 1\,0\,|\,\lambda'\,0\rangle$$
$$\times\left(\langle\,\lambda\,0\ 1\,0\,|\,\lambda'\,0\,\rangle \pm \sqrt{\frac{2}{\lambda(\lambda+1)}}\,\langle\,\lambda\ -1\ 1\,1\,|\,\lambda'\,0\rangle\Big(\kappa_h - \kappa_{\ell j}\Big)\right) j_{\lambda'}(qx)$$

$\langle\,\lambda\ -m\ 1\,m\,|\,\lambda'\,0\,\rangle$ は

λ'	$m=1$	$m=0$
$\lambda+1$	$\sqrt{\dfrac{\lambda}{2(2\lambda+1)}}$	$\sqrt{\dfrac{\lambda+1}{2\lambda+1}}$
$\lambda-1$	$\sqrt{\dfrac{\lambda+1}{2(2\lambda+1)}}$	$-\sqrt{\dfrac{\lambda}{2\lambda+1}}$

であるから ($\lambda = 0$ のとき $\lambda' = \lambda+1$ だけ)

$$d^{(\pm)}(x) = \frac{1}{2\lambda+1}\Big(\lambda j_{\lambda-1}(qx) - (\lambda+1)\,j_{\lambda+1}(qx) \pm \Big(\kappa_{\ell j} - \kappa_h\Big)\Big(j_{\lambda-1}(qx) + j_{\lambda+1}(qx)\Big)\Big)$$

$j_\lambda(\rho)$ の性質 ($\lambda \neq 0$)

$$(2\lambda+1)j_\lambda = \rho\Big(j_{\lambda-1} + j_{\lambda+1}\Big), \quad j_{\lambda-1} = \left(\frac{d}{d\rho} + \frac{\lambda+1}{\rho}\right)j_\lambda, \quad j_{\lambda+1} = \left(-\frac{d}{d\rho} + \frac{\lambda}{\rho}\right)j_\lambda$$

より

$$d^{(\pm)}(x) = j'_\lambda(qx) \pm \Big(\kappa_{\ell j} - \kappa_h\Big)\frac{j_\lambda(qx)}{qx} \tag{4.90}$$

$\lambda = 0$ の場合 $\langle\, j\,\frac{1}{2}\ \lambda\, 0\,|\, j_h\,\frac{1}{2}\,\rangle$ から $j = j_h$ であり $\ell + \ell_h + \lambda =$ 偶数 より $\ell = \ell_h$ になるから $\kappa_{\ell j} = \kappa_h$ である。したがって, (4.90) は $\lambda = 0$ のときも成り立つ。(4.74), (4.87), (4.89), (4.90) から

$$K_{\rm out}(h, \ell j, \lambda : x) = \sqrt{(2\lambda+1)(2j+1)}\,\langle\, j\,\tfrac{1}{2}\ \lambda\, 0\,|\, j_h\,\tfrac{1}{2}\,\rangle\, L_{\rm out}(h, \ell j, \lambda : x)$$

ただし

$$\begin{aligned} L_{\rm out}(h, \ell j, \lambda : x) &= F_1\, j_\lambda(qx)\Big(f_h(x)\, u_{\ell j}(x) + g_h(x)\, v_{\ell j}(x)\Big) \\ &\quad - q\frac{F_2}{2M}\left[j'_\lambda(qx)\Big(f_h\, v_{\ell j} + g_h\, u_{\ell j}\Big) + \Big(\kappa_{\ell j} - \kappa_h\Big)\frac{j_\lambda(qx)}{qx}\Big(f_h\, v_{\ell j} - g_h\, u_{\ell j}\Big)\right] \end{aligned} \tag{4.91}$$

同様にして

$$K_{\rm in}(h, \ell j, \lambda : x) = \sqrt{(2\lambda+1)(2j+1)}\,\langle\, j\,\tfrac{1}{2}\ \lambda\, 0\,|\, j_h\,\tfrac{1}{2}\,\rangle\, L_{\rm in}(h, \ell j, \lambda : x)$$

$$\begin{aligned} L_{\rm in}(h, \ell j, \lambda : x) &= F_1\, j_\lambda(qx)\Big(f_h(x)\, f_{\ell j}(x) + g_h(x)\, g_{\ell j}(x)\Big) \\ &\quad - q\frac{F_2}{2M}\left[j'_\lambda(qx)\Big(f_h\, g_{\ell j} + g_h\, f_{\ell j}\Big) + \Big(\kappa_{\ell j} - \kappa_h\Big)\frac{j_\lambda(qx)}{qx}\Big(f_h\, g_{\ell j} - g_h\, f_{\ell j}\Big)\right] \end{aligned} \tag{4.92}$$

である。L_α を用いれば

$$\begin{aligned} G_h(E, \boldsymbol{q}) = 2\sum \frac{P_{\ell+\ell_h+\lambda}}{W_{\ell j}}\,&(2\lambda+1)(2j+1)\,\langle\, j\,\tfrac{1}{2}\ \lambda\, 0\,|\, j_h\,\tfrac{1}{2}\,\rangle^2 \\ &\times \int dx\, dy\, \theta(x-y)\, L_{\rm out}(h, \ell j, \lambda : x)\, L_{\rm in}(h, \ell j, \lambda : y) \end{aligned} \tag{4.93}$$

L_α の書き換え

$$A_1(x) = F_1\Big(f_h\, u_{\ell j} + g_h\, v_{\ell j}\Big) - \frac{F_2}{2M}\frac{\kappa_{\ell j} - \kappa_h}{x}\Big(f_h\, v_{\ell j} - g_h\, u_{\ell j}\Big)\,, \quad A_2(x) = \frac{F_2}{2M}\Big(f_h\, v_{\ell j} + g_h\, u_{\ell j}\Big)$$

$$B_1(x) = F_1\Big(f_h\, f_{\ell j} + g_h\, g_{\ell j}\Big) - \frac{F_2}{2M}\frac{\kappa_{\ell j} - \kappa_h}{x}\Big(f_h\, g_{\ell j} - g_h\, f_{\ell j}\Big)\,, \quad B_2(x) = \frac{F_2}{2M}\Big(f_h\, g_{\ell j} + g_h\, f_{\ell j}\Big)$$

とおくと

$$L_{\rm out} = j_\lambda(qx)A_1(x) - \frac{dj_\lambda(qx)}{dx}A_2(x)\,, \qquad L_{\rm in} = j_\lambda(qx)B_1(x) - \frac{dj_\lambda(qx)}{dx}B_2(x)$$

であるから

$$I = \int dx\, dy\, \theta(x-y)\, L_{\rm out}(h, \ell j, \lambda : x)\, L_{\rm in}(h, \ell j, \lambda : y) = I_1 + I_2 + I_3 + I_4$$

ただし

$$I_1 = \int dx\, dy\, \theta(x-y)\, j_\lambda(qx)A_1(x)j_\lambda(qy)B_1(y)$$

$$I_2 = -\int dx\, dy\, \theta(x-y)\, \frac{dj_\lambda(qx)}{dx}A_2(x)j_\lambda(qy)B_1(y)$$

$$I_3 = -\int dx\, dy\, \theta(x-y)\, j_\lambda(qx)A_1(x)\frac{dj_\lambda(qy)}{dy}B_2(y)$$

$$I_4 = \int dx\, dy\, \theta(x-y)\, \frac{dj_\lambda(qx)}{dx}A_2(x)\frac{dj_\lambda(qy)}{dy}B_2(y)$$

である。

$$I_2 = -\int dy\, j_\lambda(qy) B_1(y) \left(\Big[\theta(x-y)\, j_\lambda(qx) A_2(x) \Big]_{x=0}^{x=\infty} - \int dx\, j_\lambda(qx) \frac{d}{dx} \theta(x-y) A_2(x) \right)$$

$\theta(-y) = 0\,,\ A_2(x) \xrightarrow{x\to\infty} 0$ であるから

$$\begin{aligned} I_2 &= \int dy\, j_\lambda(qy) B_1(y) \int dx\, j_\lambda(qx) \Big(\delta(x-y) A_2(x) + \theta(x-y) A_2'(x) \Big) \\ &= \int dx\, j_\lambda^2(qx) A_2(x) B_1(x) + \int dx\, dy\, \theta(x-y)\, j_\lambda(qx) A_2'(x) j_\lambda(qy) B_1(y) \end{aligned}$$

になる。

$$I_3 = -\int dx\, j_\lambda(qx) A_1(x) \left(\Big[\theta(x-y)\, j_\lambda(qy) B_2(y) \Big]_{y=0}^{y=\infty} - \int dy\, j_\lambda(qy) \frac{d}{dy} \theta(x-y) B_2(y) \right)$$

$\theta(x-\infty) = 0\,,\ B_2(y) \xrightarrow{y\to 0} 0$ より

$$I_3 = -\int dx\, j_\lambda^2(qx) A_1(x) B_2(x) + \int dx\, dy\, \theta(x-y)\, j_\lambda(qx) A_1(x) j_\lambda(qy) B_2'(y)$$

である。同様にして

$$\begin{aligned} I_4 &= -\int dx\, j_\lambda(qx) \frac{dj_\lambda(qx)}{dx} A_2(x) B_2(x) - \int dx\, j_\lambda(qx) A_2'(x) \int dy\, \theta(x-y)\, \frac{dj_\lambda(qy)}{dy} B_2(y) \\ &= -\int dx\, j_\lambda(qx) \frac{dj_\lambda(qx)}{dx} A_2(x) B_2(x) - \int dx\, j_\lambda^2(qx) A_2'(x) B_2(x) \\ &\quad + \int dx\, dy\, \theta(x-y)\, j_\lambda(qx) A_2'(x) j_\lambda(qy) B_2'(y) \\ &= \frac{1}{2} \int dx\, j_\lambda^2(qx)\, (A_2 B_2)' - \int dx\, j_\lambda^2(qx) A_2'(x) B_2(x) + \int dx\, dy\, \theta(x-y)\, j_\lambda(qx) A_2'(x) j_\lambda(qy) B_2'(y) \end{aligned}$$

したがって

$$\begin{aligned} I &= \int dx\, dy\, \theta(x-y)\, j_\lambda(qx) \Big(A_1(x) + A_2'(x) \Big) j_\lambda(qy) \Big(B_1(y) + B_2'(y) \Big) \\ &\quad + \int dx\, j_\lambda^2(qx) \left(A_2 B_1 - A_1 B_2 + \frac{A_2 B_2' - A_2' B_2}{2} \right) \end{aligned}$$

になる。

$$M_\pm(E) = M + V_{\mathrm{S}}(x) \pm \Big(V_0(x) - E \Big)$$

とすると, ディラック方程式 (4.56), (4.57) より

$$\begin{aligned} \frac{d}{dx} \Big(f_h\, v_{\ell j} + g_h\, u_{\ell j} \Big) &= \Big(-\frac{\kappa_h}{x} f_h + M_-(E_h) g_h \Big) v_{\ell j} + f_h \left(\frac{\kappa_{\ell j}}{x} v_{\ell j} + M_+(E) u_{\ell j} \right) \\ &\quad + \Big(\frac{\kappa_h}{x} g_h + M_+(E_h) f_h \Big) u_{\ell j} + g_h \left(-\frac{\kappa_{\ell j}}{x} u_{\ell j} + M_-(E) v_{\ell j} \right) \\ &= \frac{\kappa_{\ell j} - \kappa_h}{x} \Big(f_h v_{\ell j} - g_h u_{\ell j} \Big) + 2\tilde{M}_+ f_h u_{\ell j} + 2\tilde{M}_- g_h v_{\ell j} \end{aligned}$$

ただし

$$\tilde{M}_\pm = \frac{M_\pm(E_h) + M_\pm(E)}{2} = M + V_{\mathrm{S}}(x) \pm \left(V_0(x) - \frac{E + E_h}{2} \right)$$

これから

$$A_{\rm out}(h,\ell j:x) \equiv A_1 + A_2' = \left(F_1 + \frac{\tilde{M}_+}{M}F_2\right) f_h u_{\ell j} + \left(F_1 + \frac{\tilde{M}_-}{M}F_2\right) g_h v_{\ell j} \tag{4.94}$$

$$A_{\rm in}(h,\ell j:x) \equiv B_1 + B_2' = \left(F_1 + \frac{\tilde{M}_+}{M}F_2\right) f_h f_{\ell j} + \left(F_1 + \frac{\tilde{M}_-}{M}F_2\right) g_h g_{\ell j} \tag{4.95}$$

である。また, A, B の定義から

$$A_2B_1 - A_1B_2 = \frac{F_2}{2M}\Big(u_{\ell j}g_{\ell j} - v_{\ell j}f_{\ell j}\Big)\left(F_1\left(g_h^2 - f_h^2\right) - \frac{F_2}{M}\frac{\kappa_{\ell j}-\kappa_h}{x}\, f_h g_h\right)$$

$$\frac{A_2B_2' - A_2'B_2}{2} = \left(\frac{F_2}{2M}\right)^2\Big(u_{\ell j}g_{\ell j} - v_{\ell j}f_{\ell j}\Big)\left(\frac{\kappa_{\ell j}-\kappa_h}{x}f_h g_h - \tilde{M}_+ f_h^2 + \tilde{M}_- g_h^2\right)$$

以上から

$$I = \int dx\,dy\,\theta(x-y)\,j_\lambda(qx)A_{\rm out}(h,\ell j:x)j_\lambda(qy)A_{\rm in}(h,\ell j:y)$$
$$- W_{\ell j}\frac{F_2}{2M}\int dx\,j_\lambda^2(qx)\left(F_1\left(f_h^2 - g_h^2\right) + \frac{F_2}{2M}\left(\tilde{M}_+ f_h^2 - \tilde{M}_- g_h^2 + \frac{\kappa_{\ell j}-\kappa_h}{x}f_h g_h\right)\right)$$

になる。したがって

$$\begin{aligned}G_h(E,\boldsymbol{q}) = {}& 2\sum \frac{P_{\ell+\ell_h+\lambda}}{W_{\ell j}}\,(2\lambda+1)(2j+1)\,\langle\, j\,\tfrac{1}{2}\ \lambda\, 0\,|\, j_h\ \tfrac{1}{2}\,\rangle^2 \\ & \times\int dx\,dy\,\theta(x-y)\,j_\lambda(qx)A_{\rm out}(h,\ell j:x)j_\lambda(qy)A_{\rm in}(h,\ell j:y) \\ & - \frac{F_2}{M}\sum P_{\ell+\ell_h+\lambda}\,(2\lambda+1)(2j+1)\,\langle\, j\,\tfrac{1}{2}\ \lambda\, 0\,|\, j_h\ \tfrac{1}{2}\,\rangle^2 \\ & \times\int dx\,j_\lambda^2(qx)\left(F_1\left(f_h^2 - g_h^2\right) + \frac{F_2}{2M}\left(\tilde{M}_+ f_h^2 - \tilde{M}_- g_h^2 + \frac{\kappa_{\ell j}-\kappa_h}{x}f_h g_h\right)\right)\end{aligned} \tag{4.96}$$

1 重積分の部分は実数であり $\mathrm{Im}\, G_h$ には寄与しないから, 縦方向応答関数は

$$R(q_0,q) = \frac{1}{\pi}\mathrm{Im}\sum_h\Big(\overline{G}_h(E_h+q_0,\boldsymbol{q}) + \overline{G}_h^*(E_h-q_0,\boldsymbol{q})\Big)$$

ただし

$$\begin{aligned}\overline{G}_h(E,\boldsymbol{q}) = {}& 2\sum \frac{P_{\ell+\ell_h+\lambda}}{W_{\ell j}}\,(2\lambda+1)(2j+1)\,\langle\, j\,\tfrac{1}{2}\ \lambda\, 0\,|\, j_h\ \tfrac{1}{2}\,\rangle^2 \\ & \times\int dx\,dy\,\theta(x-y)\,j_\lambda(qx)A_{\rm out}(h,\ell j:x)j_\lambda(qy)A_{\rm in}(h,\ell j:y)\end{aligned}$$

になる。

束縛状態の波動関数 f_h, g_h 及び原点で正則な解 $f_{\ell j}$, $g_{\ell j}$ は実関数である。一方, $u_{\ell j}$, $v_{\ell j}$ は $E^2 > M^2$ の場合複素数になる。E_h として反核子は無視し核子の占有状態だけを扱う場合 $E_h = M - \varepsilon_h$, ($0 < \varepsilon_h \ll M$) とおけるから

$$q_0 > \varepsilon_h \text{ のとき } \mathrm{Im}\,\overline{G}_h(E_h+q_0,\boldsymbol{q}) \neq 0\,, \qquad q_0 > 2M - \varepsilon_h \text{ のとき } \mathrm{Im}\,\overline{G}_h^*(E_h-q_0,\boldsymbol{q}) \neq 0$$

である。準弾性散乱では $q_0 \ll 2M$ であるから $\overline{G}_h^*(E_h-q_0,\boldsymbol{q})$ の寄与は考えなくてよい。

まとめ 縦方向応答関数

$$R(q_0, q) = \frac{1}{\pi}\,\mathrm{Im}\sum_h \overline{G}_h(E_h + q_0, \boldsymbol{q}) \tag{4.97}$$

$$\begin{aligned}\overline{G}_h(E, \boldsymbol{q}) &= 2\sum_{\ell j\lambda}\frac{P_{\ell+\ell_h+\lambda}}{W_{\ell j}}\,(2\lambda+1)(2j+1)\,\langle\, j\,\tfrac{1}{2}\ \lambda\,0\,|\,j_h\,\tfrac{1}{2}\,\rangle^2\\ &\quad\times\int_0^\infty dx\,j_\lambda(qx)A_{\mathrm{out}}(h, \ell j : x)\int_0^x dy\,j_\lambda(qy)A_{\mathrm{in}}(h, \ell j : y)\end{aligned} \tag{4.98}$$

ただし

$$\left.\begin{array}{c} A_{\mathrm{out}}(h, \ell j : x)\\ A_{\mathrm{in}}(h, \ell j : x)\end{array}\right\} = \left(F_1 + \frac{\tilde{M}_+}{M}F_2\right) f_h(x)\left\{\begin{array}{c} u_{\ell j}(x)\\ f_{\ell j}(x)\end{array}\right\} + \left(F_1 + \frac{\tilde{M}_-}{M}F_2\right) g_h(x)\left\{\begin{array}{c} v_{\ell j}(x)\\ g_{\ell j}(x)\end{array}\right\}$$

$$\tilde{M}_\pm = M + V_{\mathrm{S}}(x) \pm \left(V_0(x) - \frac{E+E_h}{2}\right), \qquad W_{\ell j} = u_{\ell j}(x)g_{\ell j}(x) - v_{\ell j}(x)f_{\ell j}(x) = \text{定数}$$

F_1, F_2 は (4.29)～(4.31) で与えられる。$(u, v) = (u_{\ell j}, v_{\ell j})$, $(f_{\ell j}, g_{\ell j})$ は

$$\frac{du}{dx} = -\frac{\kappa_{\ell j}}{x}u + \Big(M + V_{\mathrm{S}} - V_0 + E\Big)v\,, \qquad \frac{dv}{dx} = \frac{\kappa_{\ell j}}{x}\,v + \Big(M + V_{\mathrm{S}} + V_0 - E\Big)u \tag{4.99}$$

$$\kappa_{\ell j} = (-1)^{j+\ell+1/2}\left(j + \frac{1}{2}\right) = \begin{cases} \ell\,, & j = \ell - 1/2\ \text{のとき}\\ -\ell - 1\,, & j = \ell + 1/2\ \text{のとき}\end{cases}$$

の解で境界条件

$$u_{\ell j} \xrightarrow{x\to\infty} kx\,h_\ell^{(+)}(kx)\,, \qquad v_{\ell j}(x) \xrightarrow{x\to\infty} \mp\frac{k}{M+E}\,kx\,h_{\ell\pm1}^{(+)}(kx)\,, \quad j = \ell \pm 1/2 \tag{4.100}$$

ただし

$$k = \begin{cases} \sqrt{E^2 - M^2}\,, & E^2 > M^2\\ i\sqrt{M^2 - E^2}\,, & E^2 < M^2\end{cases}$$

または

$$f_{\ell j} \xrightarrow{x\to 0} x^{\ell+1}\,, \qquad g_{\ell j} \xrightarrow{x\to 0} \begin{cases} \dfrac{2\ell+1}{M + V_{\mathrm{S}}(0) - V_0(0) + E}\,x^\ell\,, & j = \ell - 1/2\\[2ex] \dfrac{M + V_{\mathrm{S}}(0) + V_0(0) - E}{2\ell+3}\,x^{\ell+2}\,, & j = \ell + 1/2\end{cases} \tag{4.101}$$

を満たす。

4.11 数値計算

ディラック方程式 (4.99) は $X_1(x) = u(x)$, $X_2(x) = v(x)$ とすると

$$\frac{dX_1}{dx} = F_1(X_1, X_2, x)\,, \qquad \frac{dX_2}{dx} = F_2(X_1, X_2, x)$$

ただし

$$F_1(X_1, X_2, x) = -\frac{\kappa_{\ell j}}{x}X_1 + \frac{M + E + V_{\mathrm{S}}(x) - V_0(x)}{\hbar c}\,X_2$$

$$F_2(X_1, X_2, x) = \frac{\kappa_{\ell j}}{x}\,X_2 + \frac{M - E + V_{\mathrm{S}}(x) + V_0(x)}{\hbar c}\,X_1$$

になるから Runge–Kutta 法が適用できる。

束縛状態の波動関数と固有値

固有値 E_h の求め方はシュレディンガー方程式の場合と同様である。$x_{\rm min} \le x \le x_{\rm max}$ の範囲で解くとする。E を与えて, 適当な中間点 x_m まで $x_{\rm min}$ から x を増加させて得られる $f_h(x)$, $g_h(x)$ を $f_<(E,x)$, $g_<(E,x)$ とし, $x_{\rm max}$ から x を減少させて x_m まで解いて求まる $f_h(x)$, $g_h(x)$ を $f_>(E,x)$, $g_>(E,x)$ とすると

$$W(E) = g_<(E,x_m)\, f_>(E,x_m) - f_<(E,x_m)\, g_>(E,x_m) = 0$$

になる E が求めたい E_h である。

$x = x_{\rm min}$ での境界条件は (4.101) である。束縛状態の場合 $E_h < M$ であるから $k = \sqrt{M^2 - E_h^2}$ と置きなおすと, (4.100) より

$$f_h(x) \xrightarrow{x\to\infty} ikx\, h_\ell^{(+)}(ikx) = e^{-kx - i(\ell+1)\pi/2}\,(1+\cdots)$$

$$g_h(x) \xrightarrow{x\to\infty} \pm\frac{ik}{M+E_h}\, ikx\, h_{\ell\mp1}^{(+)}(ikx) = -\frac{k}{M+E_h} e^{-kx - i(\ell+1)\pi/2}\,(1+\cdots)$$

であるから, $x = x_{\rm max}$ では

$$f_h(x) = e^{-kx}\,, \qquad g_h(x) = -\frac{k}{M+E_h} e^{-kx}$$

とする。規格化は

$$\int_0^\infty dx\left(f_h^2(x) + g_h^2(x)\right) = 1$$

である。

境界条件 (4.100), (4.101) の解

$x = x_{\rm max}$ での初期条件を (4.100) とし x を減少させて $x_{\rm min}$ まで解けばよい。陽子の場合, 純粋なクーロン波動関数を初期条件に用いるべきである。しかし, その代わりに, $x_{\rm max}$ を束縛状態を求める場合の設定とは別の $X_{\rm max}$ にして ($X_{\rm max} > x_{\rm max}$) この点での値を

$$\rho h_\ell^{(+)}(\rho) = \exp\left(i\left(\rho - \frac{\ell+1}{2}\pi\right)\right)\left(1 + i\,\frac{\ell(\ell+1)}{2}\frac{1}{\rho}\right)$$

で近似して, $x_{\rm min} \le x \le x_{\rm max}$ の部分を使うのでもよいだろう。境界条件 (4.101) の解は $x = x_{\rm min}$ での初期条件を (4.101) とし x を増加させて $x_{\rm max}$ まで求める。

(4.98) の和

(4.98) は

$$\overline{G}_h(E,\boldsymbol{q}) = 2\sum_{\lambda=0}^{\lambda_{\rm max}}\sum_{\ell j}\frac{P_{\ell+\ell_h+\lambda}}{W_{\ell j}}\,(2\lambda+1)(2j+1)\,\langle\, j\,\tfrac{1}{2}\;\lambda\,0\,|\,j_h\,\tfrac{1}{2}\,\rangle^2$$
$$\times\int_0^\infty dx\, j_\lambda(qx) A_{\rm out}(h,\ell j : x)\int_0^x dy\, j_\lambda(qy) A_{\rm in}(h,\ell j : y)$$

である。厳密には $\lambda_{\rm max} = \infty$ であるが, 有限な $\lambda_{\rm max}$ で λ についての和は数値的には収束する。

ℓ_h , j_h と λ が与えられたとき ℓ と j は

$$\ell + \ell_h + \lambda = {\rm even}\,, \qquad |\, j_h - \lambda\,| \le j \le j_h + \lambda$$

で制限される。第1式から

$$\ell = \ell_h + \lambda - 2n\,, \quad n = \text{整数}$$

とおける。

$j = \ell + 1/2$ のとき

$$n_{\min} = \frac{2\ell_h - 2j_h + 1}{4} \leq n \leq n_{\max} = \frac{2\ell_h + 2\lambda - 2|\, j_h - \lambda\,| + 1}{4}$$

である。$\ell \geq 0$ であるためには $n \leq (\ell_h + \lambda)/2$ でなければならないが

$$\frac{\ell_h + \lambda}{2} - \frac{2\ell_h + 2\lambda - 2|\, j_h - \lambda\,| + 1}{4} = \frac{2|\, j_h - \lambda\,| - 1}{4} \geq 0$$

であるから自動的に満たす。

$$\frac{2\ell_h - 2j_h + 1}{4} = \begin{cases} 0\,, & j_h = l_h + 1/2 \\ 1/2\,, & j_h = l_h - 1/2 \end{cases}\,, \quad \text{したがって} \quad n_{\min} = \begin{cases} 0\,, & j_h = l_h + 1/2 \\ 1\,, & j_h = l_h - 1/2 \end{cases}$$

数値計算上では 整数/整数 は切り下げになるから

$$n_{\min} = \frac{2\ell_h - 2j_h + 1 + 2}{4}$$

とすればよい。

$j = \ell - 1/2$ のとき

$$n_{\min} = \frac{2\ell_h - 2j_h - 1}{4} \leq n \leq n_{\max} = \frac{2\ell_h + 2\lambda - 2|\, j_h - \lambda\,| - 1}{4}$$

である。$\ell \geq 1$ より $n \leq (\ell_h + \lambda - 2)/2$ である。

$$\frac{\ell_h + \lambda - 2}{2} - \frac{2\ell_h + 2\lambda - 2|\, j_h - \lambda\,| - 1}{4} = \frac{2|\, j_h - \lambda\,| - 3}{4}$$

したがって

$$n_{\max} = \begin{cases} \dfrac{\ell_h + \lambda - 2}{2} & |\, j_h - \lambda\,| = 1/2 \\ \dfrac{2\ell_h + 2\lambda - 2|\, j_h - \lambda\,| - 1}{4} & |\, j_h - \lambda\,| > 1/2 \end{cases}$$

である。一方

$$\frac{2\ell_h - 2j_h - 1}{4} = \begin{cases} -1/2\,, & j_h = l_h + 1/2 \\ 0\,, & j_h = l_h - 1/2 \end{cases}\,, \quad \text{したがって} \quad n_{\min} = 0$$

になる。

2重積分

$$I = \int_0^\infty dx\, f(x) \int_0^x dy\, g(y) = \int_0^\infty dx\, f(x) G(x)\,, \qquad G(x) = \int_0^x dy\, g(y)$$

x を Δx の刻みで分割して

$$x_k = x_0 + k\Delta x\,, \qquad 0 \leq k \leq K$$

とし台形則を使うと

$$I = \left(\frac{f_K G_K}{2} + \sum_{k=1}^{K-1} f_k G_k \right) (\Delta x)^2$$

ただし

$$G_k = \frac{g_0 + g_k}{2} + \sum_{j=1}^{k-1} g_j \tag{4.102}$$

である。k が与えられる毎に j について $k-1$ まで和をとるのは非常に無駄である。

$$\frac{g_{k-1}+g_k}{2} + G_{k-1} = \frac{g_{k-1}+g_k}{2} + \frac{g_0+g_{k-1}}{2} + \sum_{j=1}^{k-2} g_j = \frac{g_0+g_k}{2} + \sum_{j=1}^{k-1} g_j = G_k$$

したがって, 漸化式

$$G_0 = 0\,, \qquad G_k = \frac{g_{k-1}+g_k}{2} + G_{k-1} \quad (\ k \geq 1\ )$$

を用いればよい。(4.102) を用いた場合 I を求めるのに必要な和の回数は K^2 のオーダーであるが, 漸化式を用いれば K のオーダーになる。

4.12 クーロン波動関数

クーロンポテンシャル $V_{\rm C}(x)$ は $1/x$ でゆっくり減少する。したがって, 中性子に対しては, 自由粒子の解 (4.100) は, 例えば $x \approx 3R$ 程度でも非常によい近似になるが, 陽子に対しては, x を極端に大きくとらないと (4.100) はよい近似解にはならない。

純粋なクーロンポテンシャルの解析解を求める。(4.56), (4.57) において

$$V_{\rm S}(x) = 0\,, \qquad V_0(x) = \frac{Z\alpha}{x}$$

の場合

$$\frac{du}{dx} = -\frac{\kappa_{\ell j}}{x} u(x) + \left(M - \frac{Z\alpha}{x} + E \right) v(x)\,, \qquad \frac{dv}{dx} = \frac{\kappa_{\ell j}}{x}\, v(r) + \left(M + \frac{Z\alpha}{x} - E \right) u(x) \tag{4.103}$$

$x \to \infty$ のとき

$$\frac{du}{dx} = (E+M)\, v\,, \qquad \frac{dv}{dx} = -\,(E-M)\, u$$

であるから

$$\frac{d^2u}{dx^2} = -\,k^2\, u\,, \quad \frac{d^2v}{dx^2} = -\,k^2\, v\,, \qquad k = \sqrt{E^2 - M^2}$$

したがって, u, v ともに $e^{\pm ikr}$ になる。一方, $x \to 0$ では

$$\frac{du}{dx} = -\,\frac{\kappa_{\ell j}}{x}\, u - \frac{Z\alpha}{x}\, v\,, \qquad \frac{dv}{dx} = \frac{\kappa_{\ell j}}{x}\, v + \frac{Z\alpha}{x}\, u$$

になるから, $u = C_u\, x^a$, $v = C_v\, x^a$ とすると

$$(a + \kappa_{\ell j})\, C_u = -\,Z\alpha\, C_v\,, \qquad (a - \kappa_{\ell j})\, C_v = Z\alpha\, C_u$$

これから

$$a = \pm\,\gamma\,, \qquad \gamma = \sqrt{\kappa_{\ell j}^2 - Z^2\alpha^2}$$

以上から

$$u = C_u\, e^{-\rho/2} \rho^\gamma\, (G_1 + G_2)\ , \quad v = C_v\, e^{-\rho/2} \rho^\gamma\, (G_1 - G_2)\ , \qquad \rho = -2ikx$$

とおくと, (4.103) の最初の式は

$$\rho\left(\frac{dG_1}{d\rho}+\frac{dG_2}{d\rho}\right)+(\gamma+\kappa_{\ell j})\,(G_1+G_2)$$
$$-\frac{1}{2}\left(1-\frac{E+m}{ik}\frac{C_v}{C_u}\right)\rho\,G_1-\frac{1}{2}\left(1+\frac{E+m}{ik}\frac{C_v}{C_u}\right)\rho\,G_2+Z\alpha\frac{C_v}{C_u}\,(G_1-G_2)=0$$

したがって

$$C_v=\frac{ik}{E+M}C_u=i\sqrt{\frac{E-M}{E+M}}C_u$$

すると

$$\rho\left(\frac{dG_1}{d\rho}+\frac{dG_2}{d\rho}\right)+(\gamma+\kappa_{\ell j})\,(G_1+G_2)-\rho\,G_2+i\frac{Z\alpha k}{E+M}\,(G_1-G_2)=0$$

同様にして, 2 番目の式から

$$\rho\left(\frac{dG_1}{d\rho}-\frac{dG_2}{d\rho}\right)+(\gamma-\kappa_{\ell j})\,(G_1-G_2)+\rho\,G_2+i\frac{Z\alpha k}{E-M}\,(G_1+G_2)=0$$

これらの和, 差をとれば

$$\rho\,\frac{dG_1}{d\rho}+(\gamma+i\nu)\,G_1+(\kappa_{\ell j}+i\mu)\,G_2=0 \tag{4.104}$$

$$\rho\,\frac{dG_2}{d\rho}+(\gamma-i\nu-\rho)\,G_2+(\kappa_{\ell j}-i\mu)\,G_1=0 \tag{4.105}$$

ただし

$$\nu=\frac{Z\alpha E}{k}\,,\qquad \mu=\frac{Z\alpha M}{k}$$

最初の式を ρ で微分し, $dG_2/d\rho$ に第 2 式を代入すると

$$\rho\,\frac{d^2G_1}{d\rho^2}+(1+2\gamma-\rho)\,\frac{dG_1}{d\rho}-(\gamma+i\nu)\,G_1=0 \tag{4.106}$$

同様にして

$$\rho\,\frac{d^2G_2}{d\rho^2}+(1+2\gamma-\rho)\,\frac{dG_2}{d\rho}-(1+\gamma+i\nu)\,G_2=0 \tag{4.107}$$

これらは合流型超幾何微分方程式

$$\left(z\frac{d^2}{dz^2}+(b-z)\frac{d}{dz}-a\right)w(z)=0$$

である。原点で正則な解は

$$w=M(a,b,z)=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(a)_n}{(b)_n}\frac{z^n}{n!}\,,\qquad (a)_0=1\,,\quad (a)_n=a(a+1)\cdots(a+n-1)$$

正則でない解は

$$w=z^{1-b}\,M(1+a-b,2-b,z)$$

である。あるいは

$$U(a,b,z)=\frac{\pi}{\sin\pi b}\left(\frac{M(a,b,z)}{\Gamma(1+a-b)\Gamma(b)}-z^{1-b}\frac{M(1+a-b,2-b,z)}{\Gamma(a)\Gamma(2-b)}\right)$$

とすると, 独立な 2 つの解として

$$U(a,b,z)\,,\quad e^zU(b-a,b,-z)$$

を採用してもよい。

無限遠で外向き球面波 e^{ikx} になる解を求める。(4.106), (4.107) の解として

$$G_1(\rho) = C_1\, U(\gamma + i\nu,\, 1 + 2\gamma,\, \rho\,)\,, \quad G_2(\rho) = C_2\, U(1 + \gamma + i\nu,\, 1 + 2\gamma,\, \rho\,)$$

を考える。これらを (4.104) に代入し (13.4.23)

$$z\frac{d}{dz}U(a, b, z) = a(1 + a - b)U(a + 1, b, z) - aU(a, b, z)$$

を使うと

$$\begin{aligned}
&\rho\,\frac{dG_1}{d\rho} + (\gamma + i\nu)\,G_1 + (\kappa_{\ell j} + i\mu)\,G_2 \\
&= \Big(-(\gamma + i\nu)(\gamma - i\nu)C_1 + (\kappa_{\ell j} + i\mu)C_2\Big)U(1 + \gamma + i\nu,\, 1 + 2\gamma,\, \rho\,) = 0
\end{aligned}$$

したがって

$$C_2 = \frac{\gamma^2 + \nu^2}{\kappa_{\ell j} + i\mu}\,C_1 = (\kappa_{\ell j} - i\mu)\,C_1$$

これから

$$u = C_u e^{-\rho/2}\rho^{\gamma}\Big(U(\gamma + i\nu,\, 1 + 2\gamma,\, \rho\,) + (\kappa_{\ell j} - i\mu)\,U(1 + \gamma + i\nu,\, 1 + 2\gamma,\, \rho\,)\Big) \tag{4.108}$$

$$v = \frac{ik}{E + M}C_u e^{-\rho/2}\rho^{\gamma}\Big(U(\gamma + i\nu,\, 1 + 2\gamma,\, \rho\,) - (\kappa_{\ell j} - i\mu)\,U(1 + \gamma + i\nu,\, 1 + 2\gamma,\, \rho\,)\Big) \tag{4.109}$$

になる。

Handbook of mathmatical functions (13.5.2) から

$$U(a, b, z) = z^{-a}g(a, 1 + a - b, -z)\,, \quad \text{ただし} \quad g(a, b, z) = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{(a)_n(b)_n}{n!\,z^n}$$

である。

$$\rho^{-i\nu} = \exp\,(-i\nu\log\rho) = \exp\Big(-i\nu(\log 2kx - i\pi/2)\Big)$$

より

$$\begin{aligned}
u &= C_u e^{-\pi\nu/2}e^{i(kx - \nu\log 2kx)} \\
&\quad\times\left(g(\gamma + i\nu,\, -\gamma + i\nu,\, 2ikx) - \frac{\kappa_{\ell j} - i\mu}{2ikx}g(1 + \gamma + i\nu,\, 1 - \gamma + i\nu,\, 2ikx)\right)
\end{aligned} \tag{4.110}$$

$$\begin{aligned}
v &= \frac{ik}{E + M}\,C_u e^{-\pi\nu/2}e^{i(kx - \nu\log 2kx)} \\
&\quad\times\left(g(\gamma + i\nu,\, -\gamma + i\nu,\, 2ikx) + \frac{\kappa_{\ell j} - i\mu}{2ikx}g(1 + \gamma + i\nu,\, 1 - \gamma + i\nu,\, 2ikx)\right)
\end{aligned} \tag{4.111}$$

$x \longrightarrow \infty$ のとき $g \longrightarrow 1$ であるから

$$u \longrightarrow C_u e^{-\pi\nu/2}e^{i(kx - \nu\log 2kx)}\,, \qquad v \longrightarrow \frac{ik}{E + M}\,C_u e^{-\pi\nu/2}e^{i(kx - \nu\log 2kx)}$$

(4.108), (4.109) は無限遠で外向き球面波になる。

陽子に場合, (4.100) の代わりに (4.108), (4.109), あるいは (4.110), (4.111) を使った方が正確である。

5 軸対称変形核における Dirac–Hartree 方程式

Y. K. Gambhir, P. Ring and A. Thimet, Ann. Phys. **198** (1990) 132
S.-J. Lee et al., Phys. Rev. Lett. **57** (1986) 2916
C. E. Price and G. E. Walker, Phys. Rev. **C36** (1987) 354
R. J. Furnstahl, C. E. Price and G. E. Walker, Phys. Rev. **C36** (1987) 2590

5.1 Dirac–Hartree 方程式

Dirac–Hartree 方程式

ラグランジアン $\mathcal{L}$ として

$$\begin{aligned}\mathcal{L} = {}&\overline{\psi}\left(i\gamma\partial - M\right)\psi + \frac{1}{2}\left(\partial\sigma\right)^2 - U(\sigma) - \frac{1}{4}\omega^{\mu\nu}\omega_{\mu\nu} + \frac{1}{2}m_\omega^2\omega^2 - \frac{1}{4}\vec{\rho}^{\mu\nu}\vec{\rho}_{\mu\nu} + \frac{1}{2}m_\rho^2\vec{\rho}^2 - \frac{1}{4}A^{\mu\nu}A_{\mu\nu}\\ &- g_\sigma\overline{\psi}\psi\sigma - g_\omega\overline{\psi}\gamma^\mu\psi\omega_\mu - g_\rho\overline{\psi}\gamma^\mu\vec{\tau}\psi\vec{\rho}_\mu - e\overline{\psi}\gamma^\mu\tau_{\mathrm{p}}\psi A_\mu\end{aligned}$$

ただし

$$U(\sigma) = \frac{m_\sigma^2}{2}\sigma^2 + \frac{g_2}{3}\sigma^3 + \frac{g_3}{4}\sigma^4$$

を考える。変分原理から

$$\begin{aligned}\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\overline{\psi}} &= \left(i\gamma\partial - M\right)\psi - g_\sigma\psi\sigma - g_\omega\gamma^\mu\psi\omega_\mu - g_\rho\gamma^\mu\vec{\tau}\psi\vec{\rho}_\mu - e\gamma^\mu\tau_{\mathrm{p}}\psi A_\mu = 0\\ \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\sigma} &\Rightarrow -\partial^2\sigma - U'(\sigma) - g_\sigma\overline{\psi}\psi = -\partial^2\sigma - m_\sigma^2\sigma - g_2\sigma^2 - g_3\sigma^3 - g_\sigma\overline{\psi}\psi = 0\\ \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\omega_\mu} &\Rightarrow \partial^2\omega^\mu + m_\omega^2\omega^\mu - g_\omega\overline{\psi}\gamma^\mu\psi = 0\\ \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\vec{\rho}_\mu} &\Rightarrow \partial^2\vec{\rho}^\mu + m_\rho^2\vec{\rho}^\mu - g_\rho\gamma^\mu\vec{\tau}\psi = 0\\ \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial A_\mu} &\Rightarrow \partial^2A^\mu - e\overline{\psi}\gamma^\mu\tau_{\mathrm{p}}\psi = 0\end{aligned}$$

である。$\gamma\partial = \gamma_0\partial_t + \boldsymbol{\gamma}\cdot\boldsymbol{\nabla}$ より ψ の満たす方程式は

$$i\partial_t\psi = \gamma_0\Big(-i\boldsymbol{\gamma}\cdot\boldsymbol{\nabla} + M + g_\sigma\sigma + g_\omega\gamma^\mu\omega_\mu + g_\rho\gamma^\mu\vec{\tau}\vec{\rho}_\mu + e\gamma^\mu\tau_{\mathrm{p}}A_\mu\Big)\psi$$

になる。static な平均場で近似すると

$$\Big[\boldsymbol{\alpha}\cdot\Big(-i\boldsymbol{\nabla} - \boldsymbol{V}(\boldsymbol{r})\Big) + \beta\Big(M + U_\sigma(\boldsymbol{r})\Big) + U(\boldsymbol{r})\Big]\,\psi_i(\boldsymbol{r}) = E_i\,\psi_i(\boldsymbol{r})$$

ただし

$$U(\boldsymbol{r}) = U_\omega^0 + \vec{\tau}\cdot\vec{U}_\rho^0 + \tau_{\mathrm{p}}U_\gamma^0\,, \qquad \boldsymbol{V}(\boldsymbol{r}) = \boldsymbol{U}_\omega + \vec{\tau}\cdot\vec{\boldsymbol{U}}_\rho + \tau_{\mathrm{p}}\boldsymbol{U}_\gamma$$

ここで U は

$$U_\sigma = g_\sigma\sigma\,, \quad U_\omega^\mu = g_\omega\omega^\mu\,, \quad \vec{U}_\rho^\mu = g_\rho\vec{\rho}^\mu\,, \quad U_\gamma^\mu = eA^\mu$$

であり

$$\begin{aligned}\left(-\boldsymbol{\nabla}^2 + m_\sigma^2\right)U_\sigma &= -g_\sigma^2\,\rho_{\mathrm{s}} - \frac{g_2}{g_\sigma}\,U_\sigma^2 - \frac{g_3}{g_\sigma^2}\,U_\sigma^3\\ \left(-\boldsymbol{\nabla}^2 + m_\omega^2\right)U_\omega^\mu &= g_\omega^2J^\mu\\ \left(-\boldsymbol{\nabla}^2 + m_\rho^2\right)\vec{U}_\rho^\mu &= g_\rho^2\vec{J}_\rho^\mu\\ -\boldsymbol{\nabla}^2U_\gamma^\mu &= e^2J_{\mathrm{p}}^\mu\end{aligned}$$

を満たす。ただし

$$\rho_{\rm s} = \sum_i \overline{\psi}_i \psi_i\,, \quad J^\mu = \sum_i \overline{\psi}_i \gamma^\mu \psi_i\,, \quad \vec{J}^\mu_\rho = \sum_i \overline{\psi}_i \vec{\tau} \gamma^\mu \psi_i\,, \quad \vec{J}^\mu_{\rm p} = \sum_i \overline{\psi}_i \tau_{\rm p} \gamma^\mu \psi_i$$

である。

4 成分スピノールを

$$\psi(\boldsymbol{r}) = \begin{pmatrix} f(\boldsymbol{r}) \\ i\,g(\boldsymbol{r}) \end{pmatrix}$$

とし

$$P = P = \boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{\nabla}\,, \qquad V = -i\,\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{V}$$

とすると, Dirac 方程式は

$$\begin{pmatrix} M^* + U & -\,iP - iV \\ -\,iP - iV & -M^* + U \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f \\ ig \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} f \\ ig \end{pmatrix}$$

つまり

$$(P+V)\,g + (M^*+U)\,f = E\,f\,, \qquad -\,(P+V)\,f - (M^*-U)\,g = E\,g$$

になる。適当な基底系 $|\,\alpha\,\rangle$ で展開して

$$f(\boldsymbol{r}) = \sum_\alpha f_\alpha |\,\alpha\,\rangle\,, \quad g(\boldsymbol{r}) = \sum_\alpha g_\alpha |\,\alpha\,\rangle$$

とすると

$$\sum_{\alpha'} \begin{pmatrix} A^{(+)}_{\alpha\alpha'} & P_{\alpha\alpha'} + V_{\alpha\alpha'} \\ -\,P_{\alpha\alpha'} - V_{\alpha\alpha'} & -\,A^{(-)}_{\alpha\alpha'} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f_{\alpha'} \\ g_{\alpha'} \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} f_\alpha \\ g_\alpha \end{pmatrix} \tag{5.1}$$

ただし

$$P_{\alpha\alpha'} = \langle\,\alpha\,|\,P\,|\,\alpha'\,\rangle\,, \qquad V_{\alpha\alpha'} = \langle\,\alpha\,|\,V\,|\,\alpha'\,\rangle\,, \qquad A^{(\pm)}_{\alpha\alpha'} = \langle\,\alpha\,|\,M^* \pm U\,|\,\alpha'\,\rangle$$

基底

2 次元等方調和振動子の固有関数は

$$\frac{\sqrt{2}}{b}\,R_{nm}(q)\,\frac{e^{im\varphi}}{\sqrt{2\pi}}\,, \qquad R_{nm}(q) = N_{nm}\,q^{|m|/2} e^{-q/2} L^{(|m|)}_n(q) \tag{5.2}$$

である。ここで

$$q = \frac{r^2}{b^2}\,, \quad b = \sqrt{\frac{\hbar}{M\omega}}\,, \quad N_{nm} = \sqrt{\frac{n!}{(n+|m|)!}}$$

このとき固有値は $E_{nm} = \hbar\omega\,(2n + |m| + 1)$ である。N_{nm} は規格化から

$$\frac{2}{b^2}\int_0^\infty dr\,r\,R^2_{nm}(q) = N^2_{nm}\frac{(n+|m|)!}{n!} = 1\,, \quad \text{つまり} \quad N_{nm} = \sqrt{\frac{n!}{(n+|m|)!}}$$

z 軸が軸対称な調和振動子の場合, 波動関数は

$$\psi(\boldsymbol{r}) = \sqrt{\frac{2}{b_0^3}}\,R_{nm}(q)\,\phi_{n_3}(\zeta)\,\frac{e^{im\varphi}}{\sqrt{2\pi}}\,, \qquad \phi_{n_3}(\zeta) = N_{n_3} H_{n_3}(\zeta)\,e^{-\zeta^2/2}$$

ただし

$$b_0^3 = b^2 b_3\,, \quad b_3 = \sqrt{\frac{\hbar}{M\omega_3}}\,, \qquad \zeta = \frac{z}{b_3}\,, \qquad N_n = \left(\sqrt{\pi}\,2^n n!\right)^{-1/2}$$

である。

4 成分スピノール

$$\psi(\boldsymbol{r}) = \begin{pmatrix} f(\boldsymbol{r}) \\ ig(\boldsymbol{r}) \end{pmatrix}$$

を 2 成分スピノール $|\,\alpha\,\rangle$ を用いて

$$f(\boldsymbol{r}) = \sum_\alpha f_\alpha |\,\alpha\,\rangle\,, \quad g(\boldsymbol{r}) = \sum_\alpha g_\alpha |\,\alpha\,\rangle$$

と展開する。ただし, $\alpha = \{n, n_3, m, m_s\}$ として

$$|\,\alpha\,\rangle = \sqrt{\frac{2}{b_0^3}}\,R_{nm}(q)\phi_{n_3}(\zeta)\frac{e^{im\varphi}}{\sqrt{2\pi}}\,|m_s\rangle$$

規格化から

$$\sum_\alpha \left(f_\alpha^2 + g_\alpha^2\right) = 1$$

である。

5.2　行列要素

P の行列要素

円筒座標を r, φ, z とすると

$$\partial_x = \cos\varphi\,\partial_r - \frac{\sin\varphi}{r}\partial_\varphi\,, \quad \partial_y = \sin\varphi\,\partial_r + \frac{\cos\varphi}{r}\partial_\varphi$$

であるから

$$P = \sigma_z\partial_z + \frac{\sigma_+}{2}e^{-i\varphi}\left(\partial_r - \frac{i\partial_\varphi}{r}\right) + \frac{\sigma_-}{2}e^{i\varphi}\left(\partial_r + \frac{i\partial_\varphi}{r}\right)$$

の行列要素は

$$\begin{aligned}\langle\,\alpha\,|\,P\,|\,\alpha'\rangle = {} & \delta_{nn'}\delta_{mm'}\delta_{m_s m_s'}\,2m_s\,B_{n_3 n_3'} \\ & + \delta_{n_3 n_3'}\Big(\delta_{m+1\,m'}\delta_{m_s\,m_s'+1}\delta_{n_3 n_3'}\,C_{nm\,n'm'} + \delta_{m\,m'+1}\delta_{m_s+1\,m_s'}\,D_{nm\,n'm'}\Big)\end{aligned}$$

になる。ただし

$$\begin{aligned} B_{n_3 n_3'} &= \frac{1}{b_3}\int_{-\infty}^{\infty} d\zeta\,\phi_{n_3}\frac{d\phi_{n_3'}}{d\zeta} \\ C_{nm\,n'm'} &= \int_0^\infty dq\,R_{nm}\left(\partial_r + \frac{m'}{r}\right)R_{n'm'} = \frac{1}{b}\int_0^\infty dq\,q^{-1/2}\,R_{nm}\left(2q\frac{d}{dq} + m'\right)R_{n'm'} \\ D_{nm\,n'm'} &= \int_0^\infty dq\,R_{nm}\left(\partial_r - \frac{m'}{r}\right)R_{n'm'} = \frac{1}{b}\int_0^\infty dq\,q^{-1/2}\,R_{nm}\left(2q\frac{d}{dq} - m'\right)R_{n'm'} \end{aligned}$$

である。1 次元調和振動子の固有関数 $\phi_n(\zeta)$ は

$$\frac{d\phi_n}{d\zeta} = \sqrt{\frac{n}{2}}\,\phi_{n-1} - \sqrt{\frac{n+1}{2}}\,\phi_{n+1} \tag{5.3}$$

を満たすから

$$B_{n_3n_3'} = \frac{1}{b_3}\left(\sqrt{n_3'/2}\,\delta_{n_3\,n_3'-1} - \sqrt{n_3/2}\,\delta_{n_3\,n_3'+1}\right)$$

となる。また, $m' = m + 1$ のとき

$$C_{nm\,n'm'} = \begin{cases} \dfrac{1}{b}\Big(\sqrt{n}\,\delta_{n'\,n-1} + \sqrt{n+m+1}\,\delta_{n'n}\Big), & m \geq 0 \\ -\dfrac{1}{b}\Big(\sqrt{n'}\,\delta_{n'\,n+1} + \sqrt{n'-m'+1}\,\delta_{n'n}\Big), & m < 0 \end{cases} \tag{5.4}$$

$m = m' + 1$ のとき

$$D_{nm\,n'm'} = -\,C_{n'm'\,nm} = \begin{cases} -\dfrac{1}{b}\Big(\sqrt{n'}\,\delta_{n'\,n+1} + \sqrt{n'+m'+1}\,\delta_{n'n}\Big), & m' \geq 0 \\ \dfrac{1}{b}\Big(\sqrt{n}\,\delta_{n'\,n-1} + \sqrt{n-m+1}\,\delta_{n'n}\Big), & m' < 0 \end{cases} \tag{5.5}$$

である。(5.4), (5.5) の導出は**付録**。

ポテンシャルの行列要素

軸対称を仮定すると $U(\boldsymbol{r})$ は角度 φ に依存しない。また, $U(r,z) = U(r,-z)$ である。密度は

$$\left(e^{-q/2}e^{-\zeta^2/2}\right)^2 = e^{-(2q)/2}e^{-(\sqrt{2}\zeta)^2/2}$$

に比例するから

$$U(r,z) = \sum_{nn_3} U_{nn_3} R_{n\,m=0}(2q)\,\phi_{n_3}(\sqrt{2}\zeta)\,, \qquad n_3 = \mathrm{even}$$

と展開すると ($U = U_\omega + \tau_3 U_\rho^0 + \tau_\mathrm{p} U_\gamma^0$)

$$\begin{aligned} \langle\,\alpha\,|\,M^* \pm U\,|\,\alpha'\rangle &= \delta_{\alpha\alpha'}M + \delta_{mm'}\,\delta_{m_sm_s'}\int dq\,d\zeta\,R_{nm}(q)\phi_{n_3}(\zeta)\,(U_\sigma \pm U)\,R_{n'm}(q)\phi_{n_3'}(\zeta) \\ &= \delta_{\alpha\alpha'}M + \delta_{mm'}\,\delta_{m_sm_s'}\mathcal{A}^{(\pm)}(nn_3, n'n_3'; m) \end{aligned} \tag{5.6}$$

ただし

$$\mathcal{A}^{(\pm)}(nn_3, n'n_3'; m) = \sum_{n''n_3''}\Big(U^\sigma \pm \big(U_\omega^0 + \tau_3 U_\rho^0 + \tau_\mathrm{p} U_\gamma^0\big)\Big)_{n''n_3''} L_m(n,n';n'')H(n_3,n_3';n_3'')$$

$$L_m(n,\,n';\,n'') = N_{nm}N_{n'm}\int_0^\infty dq\,e^{-2q}\,q^{|m|}\,L_n^{(|m|)}(q)\,L_{n'}^{(|m|)}(q)L_{n''}(2q)$$

$$H(n,\,n';\,n'') = N_nN_{n'}N_{n''}\int_{-\infty}^\infty d\zeta\,e^{-2\zeta^2}H_n(\zeta)H_{n'}(\zeta)H_{n''}(\sqrt{2}\zeta)$$

$H(n,\,n';\,n'')$ は解析的に求まる。

ベクトルポテンシャルの行列要素

ベクトルを円柱座標の r, φ, z 成分で表すと

$$\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{V} = \sigma_zV_z + \sigma_rV_r + \sigma_\varphi V_\varphi$$

ここで

$$\sigma_r = \sigma_x\cos\varphi + \sigma_y\sin\varphi = \frac{1}{2}\left(\sigma_+e^{-i\varphi} + \sigma_-e^{i\varphi}\right)$$

$$\sigma_\varphi = -\,\sigma_x\sin\varphi + \sigma_y\cos\varphi = -\,\frac{i}{2}\left(\sigma_+e^{-i\varphi} - \sigma_-e^{i\varphi}\right)$$

である。これから

$$\begin{aligned}
-i\langle\,\alpha\,|\,\sigma_\varphi V_\varphi\,|\,\alpha'\,\rangle &= \frac{1}{2}\langle\,\alpha\,|\left(\sigma_- e^{i\varphi}-\sigma_+ e^{-i\varphi}\right)V_\varphi\,|\,\alpha'\,\rangle \\
&= \delta_{m_s\,m'_s-1}\frac{1}{2\pi}\int dq\,d\zeta\,d\varphi\,R_{nm}(q)R_{n'm'}(q)\phi_{n_3}(\zeta)\phi_{n'_3}(\zeta)\,e^{i(m'+1-m)\varphi}V_\varphi(\boldsymbol{r}) \\
&\quad -\delta_{m_s\,m'_s+1}\frac{1}{2\pi}\int dq\,d\zeta\,d\varphi\,R_{nm}(q)R_{n'm'}(q)\phi_{n_3}(\zeta)\phi_{n'_3}(\zeta)\,e^{i(m'-1-m)\varphi}V_\varphi(\boldsymbol{r})
\end{aligned}$$

$V_\varphi(\boldsymbol{r})$ が φ に依存しないならば

$$\begin{aligned}
-i\langle\,\alpha\,|\,\sigma_\varphi V_\varphi\,|\,\alpha'\,\rangle &= \delta_{m_s\,m'_s-1}\delta_{m\,m'+1}\int dq\,d\zeta\,R_{nm}(q)R_{n'm'}(q)\phi_{n_3}(\zeta)\phi_{n'_3}(\zeta)\,V_\varphi(r,z) \\
&\quad -\delta_{m_s\,m'_s+1}\delta_{m\,m'-1}\int dq\,d\zeta\,R_{nm}(q)R_{n'm'}(q)\phi_{n_3}(\zeta)\phi_{n'_3}(\zeta)\,V_\varphi(r,z)
\end{aligned}$$

$U(r,z)$ とは異なり

$$V_\varphi=\sum_{nn_3}V^{(\varphi)}_{nn_3}R_{n\,m=1}(2q)\phi_{n_3}(\sqrt{2}\zeta)$$

と展開すると

$$\begin{aligned}
-i\langle\,\alpha\,|\,\sigma_\varphi V_\varphi\,|\,\alpha'\,\rangle &= \delta_{m_s\,m'_s-1}\delta_{m\,m'+1}\sum_{n''n''_3}V^{(\varphi)}_{n''n''_3}\tilde{L}_{m-1}(n',n;n'')\,H(n_3,n'_3;n''_3) \\
&\quad -\delta_{m_s\,m'_s+1}\delta_{m\,m'-1}\sum_{n''n''_3}V^{(\varphi)}_{n''n''_3}\tilde{L}_{m}(n,n';n'')\,H(n_3,n'_3;n''_3) \\
&= \delta_{m_s\,m'_s-1}\delta_{m\,m'+1}V_{n'n'_3\,nn_3}(m-1)-\delta_{m_s\,m'_s+1}\delta_{m\,m'-1}V_{nn_3\,n'n'_3}(m)
\end{aligned}$$

ただし

$$\begin{aligned}
V_{nn_3\,n'n'_3}(m) &= \sum_{n''n''_3}V^{(\varphi)}_{n''n''_3}\tilde{L}_m(n,n';n'')\,H(n_3,n'_3;n''_3) \\
\tilde{L}_m(n,n';n'') &= \int dq\,R_{nm}(q)R_{n'\,m+1}(q)\,R_{n''\,1}(2q) \\
&= \frac{\sqrt{2}\,N_{nm}N_{n'\,m+1}}{\sqrt{n''+1}}\int dq\,e^{-2q}q^{(|m|+1)/2+|m+1|/2}L_n^{(|m|)}(q)L_{n'}^{(|m+1|)}(q)L_{n''}^{(1)}(2q)
\end{aligned}$$

である。$m>0$ とすると

$$\tilde{L}_m(n,n';n'')=\frac{\sqrt{2}\,N_{nm}N_{n'\,m+1}}{\sqrt{n''+1}}\int dq\,e^{-2q}q^{m+1}L_n^{(m)}(q)L_{n'}^{(m+1)}(q)L_{n''}^{(1)}(2q)$$

$$\tilde{L}_{-m}(n,n';n'')=\tilde{L}_{m-1}(n',n\,;n'')\qquad V_{nn_3\,n'n'_3}(-m)=V_{n'n'_3\,nn_3}(m-1)$$

固有値方程式

J_z とパリティはよい量子数である。

$$J_z|\,\alpha\,\rangle=(m+m_s)\,|\,\alpha\,\rangle\,,\qquad P|\,\alpha\,\rangle=(-)^{m+n_3}|\,\alpha\,\rangle$$

J_z の固有値を Ω とし $m_0=\Omega-1/2$ すると, 4 成分スピノールのパリティ演算子は $\gamma_0 P$ であるから

$$f(\boldsymbol{r})=\sum_{\substack{nn_3\\ m_0+n_3}}f^{(+)}_{nn_3\,m=m_0}\,|nn_3m_0\rangle|\tfrac{1}{2}\rangle+\sum_{\substack{nn_3\\ m_0+1+n_3}}f^{(-)}_{nn_3\,m=m_0+1}\,|nn_3\,m_0+1\rangle|-\tfrac{1}{2}\rangle$$

$$g(\boldsymbol{r})=\sum_{\substack{nn_3\\ m_0+n_3+1}}g^{(+)}_{nn_3\,m=m_0}\,|nn_3m_0\rangle|\tfrac{1}{2}\rangle+\sum_{\substack{nn_3\\ m_0+n_3}}g^{(-)}_{nn_3\,m=m_0+1}\,|nn_3\,m_0+1\rangle|-\tfrac{1}{2}\rangle$$

である。和の下の, 例えば m_0+n_3 はパリティ +1 のとき even, −1 のとき odd になる組合せだけをとる。簡単のため

$$f^{(+)}_{nn_3}=f^{(+)}_{nn_3\,m=m_0}\,,\quad f^{(-)}_{nn_3}=f^{(-)}_{nn_3\,m=m_0+1}\,,\quad g^{(+)}_{nn_3}=g^{(+)}_{nn_3\,m=m_0+1}\,,\quad g^{(-)}_{nn_3}=f^{(-)}_{nn_3\,m=m_0}$$

とおくと ($a=\{n,n_3\}$)

$$\sum_{a'}\begin{pmatrix} A^{(+)}_{aa'}(m_0) & 0 & B_{aa'} & C_{aa'}-V_{aa'}(m_0) \\ 0 & A^{(+)}_{aa'}(m_0+1) & D_{aa'}+V_{a'a}(m_0) & -B_{aa'} \\ -B_{aa'} & -C_{aa'}+V_{aa'}(m_0) & -A^{(-)}_{aa'}(m_0) & 0 \\ -D_{aa'}-V_{a'a}(m_0) & B_{aa'} & 0 & -A^{(-)}_{aa'}(m_0+1)\end{pmatrix}\begin{pmatrix} f^{(+)}_{a'} \\ f^{(-)}_{a'} \\ g^{(+)}_{a'} \\ g^{(-)}_{a'}\end{pmatrix}$$
$$=E\begin{pmatrix} f^{(+)}_{a} \\ f^{(-)}_{a} \\ g^{(+)}_{a} \\ g^{(-)}_{a}\end{pmatrix} \tag{5.7}$$

ただし

$$A^{(\pm)}_{aa'}(m)=\delta_{aa'}M+\mathcal{A}^{(\pm)}(nn_3,n'n'_3;m)$$
$$B_{aa'}=\frac{\delta_{nn'}}{b_3}\left(\sqrt{n'_3/2}\,\delta_{n_3\,n'_3-1}-\sqrt{n_3/2}\,\delta_{n_3\,n'_3+1}\right)=-B_{a'a}$$
$$C_{aa'}=\delta_{n_3n'_3}C_{nm_0\,n'm_0+1}=\frac{\delta_{n_3n'_3}}{b}\times\begin{cases}\left(\sqrt{n}\,\delta_{n'\,n-1}+\sqrt{n+m_0+1}\,\delta_{n'n}\right), & m_0\geq 0\\ -\left(\sqrt{n'}\,\delta_{n'\,n+1}+\sqrt{n'-m_0}\,\delta_{n'n}\right), & m_0<0\end{cases}$$
$$D_{aa'}=\delta_{n_3n'_3}D_{nm_0+1\,n'm_0}=\frac{\delta_{n_3n'_3}}{b}\times\begin{cases}-\left(\sqrt{n'}\,\delta_{n'\,n+1}+\sqrt{n'+m_0+1}\,\delta_{n'n}\right), & m_0\geq 0\\ \left(\sqrt{n}\,\delta_{n'\,n-1}+\sqrt{n-m_0}\,\delta_{n'n}\right), & m_0<0\end{cases}$$
$$=-C_{a'a}$$

5.3 Klein–Gordon 方程式

ベクトルポテンシャル $\boldsymbol{U}$ の場合

$$\left(-\boldsymbol{\nabla}^2+m_{\rm b}^2\right)\boldsymbol{U}=g^2\boldsymbol{J}$$

を U_φ, U_r で表すと

$$\left(-\boldsymbol{\nabla}^2+m_{\rm b}^2\right)(U_r\cos\varphi-U_\varphi\sin\varphi)=g^2J_1\,,\quad \left(-\boldsymbol{\nabla}^2+m_{\rm b}^2\right)(U_r\sin\varphi+U_\varphi\cos\varphi)=g^2J_2$$

である。U が φ に依存しないとすると

$$\boldsymbol{\nabla}^2U\cos\varphi=\left(\frac{1}{r}\partial_r r\partial_r+\partial_z^2+\frac{1}{r^2}\partial_\varphi^2\right)U\cos\varphi=\cos\varphi\left(\boldsymbol{\nabla}^2-\frac{1}{r^2}\right)U$$

になるから

$$\cos\varphi\left(-\boldsymbol{\nabla}^2+m_{\rm b}^2\right)U_r-\sin\varphi\left(-\boldsymbol{\nabla}^2+m_{\rm b}^2\right)U_\varphi+\frac{\cos\varphi}{r^2}U_r-\frac{\sin\varphi}{r^2}U_\varphi=g^2J_1$$
$$\sin\varphi\left(-\boldsymbol{\nabla}^2+m_{\rm b}^2\right)U_r+\cos\varphi\left(-\boldsymbol{\nabla}^2+m_{\rm b}^2\right)U_\varphi+\frac{\sin\varphi}{r^2}U_r+\frac{\cos\varphi}{r^2}U_\varphi=g^2J_2$$

したがって

$$\Big(-\boldsymbol{\nabla}^2 + m_{\rm b}^2 + \frac{1}{r^2}\Big) U_r = g^2 J_r \,, \qquad \Big(-\boldsymbol{\nabla}^2 + m_{\rm b}^2 + \frac{1}{r^2}\Big) U_\varphi = g^2 J_\varphi$$

である。

$q' = r^2/b_m^2 = 2q$, $\zeta' = z/b_{m3} = \sqrt{2}\,\zeta$ とおく。ただし

$$b_m = \frac{b}{\sqrt{2}}\,, \quad b_{m3} = \frac{b_3}{\sqrt{2}}\,, \qquad b_{m0}^3 = b_m^2 b_{m3} = \frac{b_0^3}{2\sqrt{2}}$$

である。ここで $m > 0$ を固定して

$$|nn_3\rangle = \sqrt{\frac{2}{b_m^2 b_{m3}}}\, R_{nm}(q')\,\phi_{n_3}(\zeta')\,, \quad R_{nm} = N_{nm} e^{-q'/2} q'^{m/2} L_n^{(m)}(q')\,, \quad \phi_n = N_n\, e^{-\zeta'^2/2} H_n(\zeta')$$

とすると

$$\begin{aligned}
\langle nn_3|\big(-\boldsymbol{\nabla}^2 + m_{\rm b}^2\big)|n'n_3'\rangle &= \int_0^\infty dq' \int_{-\infty}^\infty d\zeta' R_{nm}(q')\phi_{n_3}(\zeta')\big(-\boldsymbol{\nabla}^2 + m^2\big) R_{n'm}(q')\phi_{n_3'}(\zeta') \\
&= \Big(\frac{2n+m+1}{b_m^2} + \frac{n_3+1/2}{b_{m3}^2} + m_{\rm b}^2 \Big)\delta_{nn'}\delta_{n_3n_3'} \\
&\quad + \frac{\delta_{n_3n_3'}}{b_m^2}\Big(\sqrt{n(n+m)}\,\delta_{n\,n'+1} + \sqrt{n'(n'+m)}\,\delta_{n+1\,n'} - m^2 c_{nn'}\Big) \\
&\quad - \frac{\delta_{nn'}}{b_{m3}^2}\left(\frac{\sqrt{(n_3+1)n_3'}}{2}\,\delta_{n_3\,n_3'-2} + \frac{\sqrt{(n_3'+1)n_3}}{2}\,\delta_{n_3\,n_3'+2}\right)
\end{aligned} \tag{5.8}$$

ただし

$$\begin{aligned}
c_{nn'} &= N_{nm}N_{n'm}\int_0^\infty dq\, e^{-q} q^{m-1} L_n^{(m)} L_{n'}^{(m)} \\
&= N_{nm}N_{nm'}\sum_{k=0}^{n_<} \frac{(k+m-1)!}{k!}\,, \qquad n_< = \min(n, n')
\end{aligned}$$

また

$$\begin{aligned}
\langle nn_3|\frac{1}{r^2}|n'n_3'\rangle &= \int_0^\infty dq' \int_{-\infty}^\infty d\zeta' R_{nm}(q')\phi_{n_3}(\zeta')\,\frac{1}{r^2}\,R_{n'm}(q')\phi_{n_3'}(\zeta') \\
&= \frac{\delta_{n_3n_3'}}{b_m^2} N_{nm}N_{n'm}\int_0^\infty dq\, e^{-q} q^{m-1} L_n^{(m)} L_{n'}^{(m)} = \frac{\delta_{n_3n_3'}}{b_m^2}\, c_{nn'}
\end{aligned}$$

である。

これから Klein–Gordon 方程式

$$\big(-\boldsymbol{\nabla}^2 + m_{\rm b}^2\big)\,U(\boldsymbol{r}) = g^2\rho(\boldsymbol{r})\,, \quad \text{または} \quad \Big(-\boldsymbol{\nabla}^2 + m_{\rm b}^2 + \frac{1}{r^2}\Big) U_\varphi(\boldsymbol{r}) = g^2 J_\varphi(\boldsymbol{r})$$

は

$$U(\boldsymbol{r}) = \sum_{nn_3} U_{nn_3}|nn_3\rangle = \sum_{nn_3} U_{nn_3}\, R_{nm}(q')\,\phi_{n_3}(\zeta')$$

とおくと

$$\sum_{n'n_3'} h_{nn_3\,n'n_3'}\, U_{n'n_3'} = g^2 s_{nn_3}$$

になる。ρ のとき $m=0$, J_φ のとき $m=1$ の展開を使うと

$$
\begin{aligned}
h_{nn_3\,n'n'_3} = &\left(\frac{2n+m+1}{b_m^2} + \frac{n_3+1/2}{b_{m3}^2} + m_\mathrm{b}^2\right)\delta_{nn'}\delta_{n_3n'_3} \\
&+ \frac{\delta_{n_3n'_3}}{b_m^2}\left(\sqrt{n(n+m)}\,\delta_{n\,n'+1} + \sqrt{n'(n'+m)}\,\delta_{n+1\,n'}\right) \\
&- \frac{\delta_{nn'}}{b_{m3}^2}\left(\frac{\sqrt{(n_3+1)n'_3}}{2}\,\delta_{n_3\,n'_3-2} + \frac{\sqrt{(n'_3+1)n_3}}{2}\,\delta_{n_3\,n'_3+2}\right)
\end{aligned}
$$

ただし ($n_3 = \mathrm{even}$)

$$
s_{nn_3} = \int_0^\infty dq' \int_{-\infty}^\infty d\zeta' R_n(q')\phi_{n_3}(\zeta')\, s(\boldsymbol{r}) = \frac{2}{b_m^2 b_{m3}} \int_0^\infty dr\, r \int_{-\infty}^\infty dz\, R_{nm}(q')\,\phi_{n_3}(\zeta')\, s(\boldsymbol{r})
$$

である。

$$
\rho_{nn_3} = \int_0^\infty dq' \int_{-\infty}^\infty d\zeta' R_n(q')\phi_{n_3}(\zeta')\, \rho(\boldsymbol{r}) = \frac{2}{b_m^2 b_{m3}} \int_0^\infty dr\, r \int_{-\infty}^\infty dz\, R_n(q')\,\phi_{n_3}(\zeta')\, \rho(\boldsymbol{r})
$$

$\rho(\boldsymbol{r})$ は波動関数の積であるから

$$
\rho(\boldsymbol{r}) = \frac{2}{b_0^3}\frac{1}{2\pi}\sum_{\alpha\alpha'} \rho_{\alpha\alpha'}\delta_{mm'}\delta_{m_sm'_s}R_{nm}(q)\phi_{n_3}(\zeta)R_{n'm}(q)\phi_{n'_3}(\zeta) \tag{5.9}
$$

という形式に展開できるから

$$
\rho_{nn_3} = \frac{1}{2\pi}\,\frac{2}{b_m^2 b_{m3}}\sum_{\alpha'\alpha''} \rho_{\alpha'\alpha''}\delta_{m'm''}\delta_{m'_sm''_s}L_{m'}(n',n'';n)\,H(n'_3,n''_3;n_3)
$$

$\rho_{aa'}$ を具体的に波動関数の展開係数で表すと

$$
\begin{aligned}
(\rho_\mathrm{s})_{\alpha\alpha'} &= \sum_i \left(f_\alpha^{(i)}f_{\alpha'}^{(i)} - g_\alpha^{(i)}g_{\alpha'}^{(i)}\right), \quad (\rho_\mathrm{B})_{\alpha\alpha'} = \sum_i \left(f_\alpha^{(i)}f_{\alpha'}^{(i)} + g_\alpha^{(i)}g_{\alpha'}^{(i)}\right) \\
(\rho_3)_{\alpha\alpha'} &= \sum_i \tau_i\left(f_\alpha^{(i)}f_{\alpha'}^{(i)} + g_\alpha^{(i)}g_{\alpha'}^{(i)}\right), \quad (\rho_\mathrm{p})_{\alpha\alpha'} = \sum_i (\tau_\mathrm{p})_i\left(f_\alpha^{(i)}f_{\alpha'}^{(i)} + g_\alpha^{(i)}g_{\alpha'}^{(i)}\right)
\end{aligned}
$$

ここで i は 占有されている状態についての和である。例えば, $(\rho_\mathrm{B})_{nn_3}$ へのある 1 つの hole 状態の寄与は

$$
\begin{aligned}
&\frac{1}{2\pi}\,\frac{2}{b_m^2 b_{m3}}\sum_{\alpha'\alpha''}\Big(f_{\alpha'}f_{\alpha''} + g_{\alpha'}g_{\alpha''}\Big)\delta_{m'm''}\delta_{m'_sm''_s}L_m(n',n'';n)\,H(n'_3,n''_3;n_3) \\
= &\frac{1}{2\pi}\,\frac{2}{b_m^2 b_{m3}}\sum_{n'n'_3n''n''_3}\Big[\Big(f^{(+)}_{n'n'_3}f^{(+)}_{n''n''_3} + g^{(+)}_{n'n'_3}g^{(+)}_{n''n''_3}\Big)L_{m_0}(n',n'';n)\,H(n'_3,n''_3;n_3) \\
&\qquad + \Big(f^{(-)}_{n'n'_3}f^{(-)}_{n''n''_3} + g^{(-)}_{n'n'_3}g^{(-)}_{n''n''_3}\Big)L_{m_0+1}(n',n'';n)\,H(n'_3,n''_3;n_3)\Big]
\end{aligned}
$$

になる。

$\rho(\boldsymbol{r})$ を ρ_{nn_3} で表すと

$$
\rho(\boldsymbol{r}) = \sum_{nn_3}\rho_{nn_3}\,R_n(q')\,\phi_{n_3}(\zeta') \tag{5.10}
$$

である。$\rho(\boldsymbol{r})$ を求める場合, (5.9) よりも (5.10) の方が数値計算的には容易に求まる。

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{\nabla}^2\rho(\boldsymbol{r}) &= \sum_{nn_3}\rho_{nn_3}\left(\frac{1}{r}\partial_r r\partial_r + \partial_z^2\right)R_n(q')\,\phi_{n_3}(\zeta') \\
&= \sum_{nn_3}\rho_{nn_3}\left(\frac{q'-2(2n+1)}{b_m^2} + \frac{\zeta'^2-(2n_3+1)}{b_{m3}^2}\right)R_n(q')\,\phi_{n_3}(\zeta') \\
&= e^{-(q'+\zeta'^2)/2}\sum_{nn_3}\rho_{nn_3}N_{n_3}L_n(q')\,H_{n_3}(\zeta')\left(\frac{q'-2(2n+1)}{b_m^2} + \frac{\zeta'^2-(2n_3+1)}{b_{m3}^2}\right)
\end{aligned} \tag{5.11}$$

非線形項

U_σ は

$$\left(-\boldsymbol{\nabla}^2+m^2\right)U_\sigma(\boldsymbol{r}) = -g_\sigma^2\rho_s(\boldsymbol{r}) - g_2g_\sigma\sigma^2 - g_3g_\sigma\sigma^3 = -g_\sigma^2\Big(\rho_s(\boldsymbol{r}) + c_2U_\sigma^2 + c_3U_\sigma^3\Big)$$

を満たす。ただし

$$c_2 = \frac{g_2}{g_\sigma^3}\,, \qquad c_3 = \frac{g_3}{g_\sigma^4}$$

である。U_σ は多項式 u を用いて

$$U_\sigma = \exp\left(-q'/2-\zeta'^2/2\right)u(q',\zeta')\,, \quad u(q',\zeta') = \sum_{nn_3}U_{nn_3}N_{n_3}L_n(q')H_{n_3}(\zeta')$$

と表せる。$U_\sigma(\boldsymbol{r})$ の非線形項の展開係数は

$$\begin{aligned}
U_{nn_3}^{(k)} &= \frac{2}{b_m^2 b_{m3}}\int_0^\infty dr\,r\int_{-\infty}^\infty dz\,R_n(q')\,\phi_{n_3}(\zeta')\,\Big(U_\sigma(\boldsymbol{r})\Big)^k \\
&= 2N_{n_3}\int_0^\infty dq'\int_0^\infty d\zeta'\,\exp\left(-\left(q'+\zeta'^2\right)/c_k\right)L_n(q')\,H_{n_3}(\zeta')\,u(q',\zeta')^k
\end{aligned}$$

ここで $c_k = 2/(k+1)$ である。$q = q'/c_k$, $\zeta = \zeta'/\sqrt{c_k}$ とおくと

$$U_{nn_3}^{(k)} = 2N_{n_3}c_k^{3/2}\int_0^\infty dq\int_0^\infty d\zeta\,\exp\left(-q-\zeta^2\right)L_n(q')\,H_{n_3}(\zeta')\,u(q',\zeta')^k$$

となる。したがって

$$f_{nn_3}(q',\zeta') = N_{n_3}L_n(q')\,H_{n_3}(\zeta')$$

とすると

$$U_{nn_3}^{(k)} = 2\,c_k^{3/2}\int_0^\infty dq\int_0^\infty d\zeta\,\exp\left(-q-\zeta^2\right)\,f_{nn_3}(q',\zeta')\,u(q',\zeta')^k$$

$$u(q',\zeta') = \sum_{nn_3}U_{nn_3}\,f_{nn_3}(q',\zeta')\,, \qquad q' = c_kq\,, \quad \zeta' = \sqrt{c_k}\zeta$$

である。U_{nn_3} が満たす非線形方程式は

$$\sum_{n'n_3'}h_{nn_3\,n'n_3'}U_{n'n_3'} = -g_\sigma^2\left((\rho_s)_{nn_3} + c_2U_{nn_3}^{(2)} + c_3U_{nn_3}^{(3)}\right)$$

となる。U_{nn_3}, $U_{nn_3}^{(2)}$, $U_{nn_3}^{(2)}$ の次元は L^{-1}, L^{-2}, L^{-3}, また, h, ρ_{nn_3}, c_2 の次元は L^{-2}, L^{-3}, L^{-1}

ベクトルポテンシャル

カレントの期待値は

$$j_\varphi(\boldsymbol{r}) = \begin{pmatrix} f^\dagger & -i\,g^\dagger \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \sigma_\varphi \\ \sigma_\varphi & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f \\ i\,g \end{pmatrix} = i\left(f^\dagger \sigma_\varphi g - g^\dagger \sigma_\varphi f\right) = 2\,\mathrm{Re}\left(i f^\dagger \sigma_\varphi g\right)$$
$$= \mathrm{Re}\left(f^\dagger \left(\sigma_+ e^{-i\varphi} - \sigma_- e^{i\varphi}\right) g\right)$$

であるから

$$\begin{aligned} j_\varphi(\boldsymbol{r}) &= \mathrm{Re}\sum_{\alpha\alpha'} f^*_\alpha\, g_{\alpha'} \Big(\langle\, \alpha\, |\sigma_+ e^{-i\varphi} \delta(\boldsymbol{r}-\hat{\boldsymbol{r}})|\, \alpha'\,\rangle - \langle\, \alpha\, |\sigma_- e^{i\varphi} \delta(\boldsymbol{r}-\hat{\boldsymbol{r}})|\, \alpha'\,\rangle \Big) \\ &= \mathrm{Re}\sum_{\alpha\alpha'} \Big(f^*_\alpha\, g_{\alpha'} - f_{\alpha'}\, g^*_\alpha \Big) \langle\, \alpha\, |\sigma_+ e^{-i\varphi} \delta(\boldsymbol{r}-\hat{\boldsymbol{r}})|\, \alpha'\,\rangle \\ &= \mathrm{Re}\sum_{\alpha\alpha'} \Big(f^*_\alpha\, g_{\alpha'} - f_{\alpha'}\, g^*_\alpha \Big) \frac{1}{2\pi}\frac{2}{b_0^3} 2\delta_{m_s\, m'_s+1} R_{nm} R_{n'm'} \phi_{n_3} \phi_{n'_3} e^{i(-m-1+m')\varphi} \end{aligned}$$

角運動量の z 成分はよい量子数であるから $-m-1+m'=0$ である。したがって

$$j_\varphi(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{\pi}\frac{2}{b_0^3}\,\mathrm{Re}\sum_{\alpha\alpha'} \Big(f^*_\alpha\, g_{\alpha'} - f_{\alpha'}\, g^*_\alpha \Big) \delta_{m_s\, m'_s+1} \delta_{m\, m'-1} R_{nm} R_{n'm'} \phi_{n_3} \phi_{n'_3}$$

となる。

$$J_{\alpha\alpha'} = \mathrm{Re}\sum_i \Big(f^{(i)\,*}_\alpha\, g^{(i)}_{\alpha'} - f^{(i)}_{\alpha'}\, g^{(i)\,*}_\alpha \Big)$$

とすると, 全カレント $J_\varphi(\boldsymbol{r})$ は

$$J_\varphi(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{\pi}\frac{2}{b_0^3} \sum_{\alpha\alpha'} J_{\alpha\alpha'} \delta_{m_s\, m'_s+1} \delta_{m\, m'-1} R_{nm}(q) R_{n'm'}(q) \phi_{n_3}(\zeta) \phi_{n'_3}(\zeta)$$

である。パリティもよい量子数であるから $\boldsymbol{J}(\boldsymbol{r}) = -\boldsymbol{J}(-\boldsymbol{r})$ である。したがって

$$J_\varphi(\boldsymbol{r}) = \boldsymbol{e}_\varphi(\boldsymbol{r})\cdot\boldsymbol{J}(\boldsymbol{r}) = (-\boldsymbol{e}_\varphi(\boldsymbol{r}))\cdot\boldsymbol{J}(-\boldsymbol{r}) = \boldsymbol{e}_\varphi(-\boldsymbol{r})\cdot\boldsymbol{J}(-\boldsymbol{r}) = J_\varphi(-\boldsymbol{r})$$

になる。上の和は ϕ_{n_3} と $\phi_{n'_3}$ が同じパリティだけの和になっている。

$$\begin{aligned} J_{nn_3} &= \frac{2}{b_m^2 b_{m3}} \int_0^\infty dr\, r \int_{-\infty}^\infty dz\, R_{n\,1}(q')\, \phi_{n_3}(\zeta')\, J_\varphi(\boldsymbol{r}) \\ &= \frac{1}{\pi}\frac{2}{b_m^2 b_{m3}} \sum_{\alpha'\alpha''} J_{\alpha'\alpha''} \delta_{m'_s\, m''_s+1} \delta_{m'\, m''-1} \\ &\quad \times \int_0^\infty dq R_{n'm'}(q) R_{n''m'+1} R_{n\,1}(2q) \int_{-\infty}^\infty d\zeta\, \phi_{n'_3}(\zeta) \phi_{n''_3}(\zeta) \phi_{n_3}(\sqrt{2}\zeta) \\ &= \frac{1}{\pi}\frac{2}{b_m^2 b_{m3}} \sum_{\alpha'\alpha''} J_{\alpha'\alpha''} \delta_{m'_s\, m''_s+1} \delta_{m'\, m''-1} \tilde{L}_{m'}(n',n'';n)\, H(n'_3,n''_3;n_3) \end{aligned}$$

ただし n_3 が odd のとき $J_{nn_3}=0$ である。

$$V_\varphi = \sum_{nn_3} V^{(\varphi)}_{nn_3} R_{n\,1}(2q) \phi_{n_3}(\sqrt{2}\zeta)$$

とすると

$$\sum_{n'n'_3} h_{nn_3\, n'n'_3} V^{(\varphi)}_{n'n'_3} = g^2 J_{nn_3}$$

により $V^{(\varphi)}_{nn_3}$ が決まる。

j_φ の和を具体的に書き下すと

$$j_\varphi(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{\pi}\frac{2}{b_0^3}\,\mathrm{Re}\sum_{\alpha\alpha'}\Big(f_\alpha^*\, g_{\alpha'} - f_{\alpha'}\, g_\alpha^*\Big)\delta_{m_s\, m_s'+1}\delta_{m\, m'-1}R_{nm}R_{n'm'}\phi_{n_3}\phi_{n_3'}$$

$$= \frac{1}{\pi}\frac{2}{b_0^3}\,\mathrm{Re}\sum_{nn_3\, n'n_3'}\Big(f_{nn_3}^{(+)}g_{n'n_3'}^{(-)} - g_{nn_3}^{(+)}f_{n'n_3'}^{(-)}\Big)\, R_{nm_0}R_{n'\, m_0+1}\phi_{n_3}\phi_{n_3'}$$

である。また, J_{nn_3} への 1 つの hole 状態の寄与は

$$\frac{1}{\pi}\frac{2}{b_m^2 b_{m3}}\sum_{n'n_3'n''n_3''}\Big(f_{n'n_3'}^{(+)}g_{n''n_3''}^{(-)} - g_{n'n_3'}^{(+)}f_{n''n_3''}^{(-)}\Big)\,\tilde{L}_{m_0}(n',n'';n)\,H(n_3',n_3'';n_3)$$

である。

クーロンポテンシャル

クーロンポテンシャル

$$V_C(r,z) = e^2\int d^3r'\,\frac{\rho_p(r',z')}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}$$

は $\boldsymbol{\nabla}'^2|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'| = 2/|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|$ を使うと

$$V_C(r,z) = \frac{e^2}{2}\int d^3r'|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|\,\boldsymbol{\nabla}'^2\rho_p(r',z')$$

$$= \frac{e^2}{2}\int_0^\infty dr'\,r'\int_{-\infty}^\infty dz'\boldsymbol{\nabla}'^2\rho_p(r',z')\int_0^{2\pi}d\theta'\sqrt{(r+r')^2+(z-z')^2-4rr'\cos^2\frac{\theta'-\theta}{2}}$$

$$= 2e^2\int_0^\infty dr'\,r'\int_{-\infty}^\infty dz'\boldsymbol{\nabla}'^2\rho_p(r',z')\int_0^{\pi/2}d\varphi\sqrt{(r+r')^2+(z-z')^2-4rr'\sin^2\varphi}$$

$$= 2e^2\int_0^\infty dr'\,r'\int_{-\infty}^\infty dz'\,\sqrt{(r+r')^2+(z-z')^2}\,E\left(x\right)\boldsymbol{\nabla}'^2\rho_p(r',z')$$

ただし

$$x = \sqrt{\frac{4rr'}{(r+r')^2+(z-z')^2}}$$

また

$$E(k) = \int_0^{\pi/2}d\varphi\,\sqrt{1-k^2\sin^2\varphi} = \int_0^1 dx\,\sqrt{\frac{1-k^2x^2}{1-x^2}}$$

は第 2 種完全楕円積分である。$\boldsymbol{\nabla}^2\rho_p(r,z)$ に (5.11) を用いると

$$V_C(r,z) = 2e^2\sum_{nn_3}\rho_{nn_3}N_{n_3}\int_0^\infty dr'\,r'\int_{-\infty}^\infty dz'\,e^{-(q'+\zeta'^2)/2}L_n(q')\,H_{n_3}(\zeta')$$

$$\left(\frac{q'-2(2n+1)}{b_m^2}+\frac{\zeta'^2-(2n_3+1)}{b_{m3}^2}\right)\sqrt{(r+r')^2+(z-z')^2}\,E\left(x\right)$$

$$= 2e^2\frac{b_0^3}{2}\sum_{nn_3}\rho_{nn_3}N_{n_3}\int_0^\infty dq\int_{-\infty}^\infty d\zeta\,\exp(-q-\zeta^2)L_n(2q)\,H_{n_3}(\sqrt{2}\zeta)$$

$$\left(\frac{2q-2(2n+1)}{b_m^2}+\frac{2\zeta^2-(2n_3+1)}{b_{m3}^2}\right)\sqrt{(r+b\sqrt{q})^2+(z-b_3\zeta)^2}\,E\left(x\right)$$

したがって

$$V_{nn_3}(r,z) = e^2\,b_0^3\,N_{n_3}\int_0^\infty dq\int_{-\infty}^\infty d\zeta\,\exp(-q-\zeta^2)L_n(2q)\,H_{n_3}(\sqrt{2}\zeta)$$

$$\left(\frac{2q-2(2n+1)}{b_m^2}+\frac{2\zeta^2-(2n_3+1)}{b_{m3}^2}\right)\sqrt{(r+b\sqrt{q})^2+(z-b_3\zeta)^2}\,E\left(x\right)$$

とすると

$$V_C(r,z) = \sum_{nn_3} \rho_{nn_3} V_{nn_3}(r,z)$$

である。

$\mathcal{A}^{(+)}(nn_3, n'n'_3; m)$ への寄与は $n_3 + n'_3 = \text{even}$ のとき

$$\begin{aligned}
&\int_0^\infty dq \int_{-\infty}^\infty d\zeta\, R_{nm}(q) R_{n'm}(q) \phi_{n_3}(\zeta) \phi_{n'_3}(\zeta)\, V_C(r,z) \\
&= 2N_{nm} N_{n'm} N_{n_3} N_{n'_3} \\
&\quad \times \int_0^\infty dq \int_0^\infty d\zeta\, \exp(-q-\zeta^2)\, q^{|m|} L_n^{(|m|)}(q) L_{n'}^{(|m|)}(q) H_{n_3}(\zeta) H_{n'_3}(\zeta)\, V_C(b\sqrt{q}, b_3\zeta)
\end{aligned}$$

また

$$\begin{aligned}
\int d^3r\, \rho(\boldsymbol{r})\, V_C(r,z) &= 2\pi \sum_{nn_3} \rho_{nn_3} N_{n_3} \int_0^\infty dr\, r \int_{-\infty}^\infty dz\, e^{-(q'+\zeta'^2)/2} L_n(q')\, H_{n_3}(\zeta')\, V_C(r,z) \\
&= 2\pi\, b_0^3 \sum_{nn_3} \rho_{nn_3} N_{n_3} \int_0^\infty dq \int_0^\infty d\zeta \exp(-q-\zeta^2) L_n(2q)\, H_{n_3}(\sqrt{2}\zeta)\, V_C(b\sqrt{q}, b_3\zeta)
\end{aligned}$$

である。Laguerre–Gauss の分点 q_i , Hermite–Gauss の分点 ζ_j における $V_C(b\sqrt{q_i}, b_3\zeta_j)$ を求めておけば数値計算できる。

5.4 初期密度

初期密度として楕円体

$$\rho(r,z) = \rho_0\, \theta\,(R_b - \tilde{r}\,)\ , \quad \rho_0 = \frac{A}{4\pi R^3/3}\,, \quad R_b = \frac{R}{b_0}\,, \quad \tilde{r} = \sqrt{\frac{r^2}{b^2} + \frac{z^2}{b_3^2}} = \sqrt{q+\zeta^2}$$

を考える。

$$\begin{aligned}
\rho_{nn_3} &= \frac{2}{b_m^2 b_{m3}} \int_0^\infty dr\, r \int_{-\infty}^\infty dz\, R_n(q')\, \phi_{n_3}(\zeta')\, \rho(\boldsymbol{r}) \\
&= 4\sqrt{2}\, \rho_0 N_{n_3} \int_0^\infty dq \int_0^\infty d\zeta \exp(-q-\zeta^2) L_n(2q)\, H_{n_3}(\sqrt{2}\zeta)\, \theta(R_b - \sqrt{q+\zeta^2})
\end{aligned}$$

である。

5.5 Magnetic moment

Dirac magnetic moment は

$$\mu_{\mathrm{D}} = g_\ell M\,(\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{\alpha})_3 = g_\ell M r\Big(\alpha_y \cos\varphi - \alpha_x \sin\varphi\Big) = g_\ell M r \alpha_\varphi$$

であるから, ある 1 粒子状態の期待値は

$$\begin{aligned}
\mu &= g_\ell M \int d^3r\, r\, j_\varphi(\boldsymbol{r}) \\
&= g_\ell M \frac{1}{\pi} \frac{2}{b_0^3} \sum_{nn_3\, n'n'_3} \Big(f^{(+)}_{nn_3} g^{(-)}_{n'n'_3} - g^{(+)}_{nn_3} f^{(-)}_{n'n'_3}\Big) \int d^3r\, r\, R_{nm_0}(q) R_{n'\, m_0+1}(q) \phi_{n_3}(\zeta) \phi_{n'_3}(\zeta) \\
&= 2b\, g_\ell M \sum_{nn_3\, n'} \Big(f^{(+)}_{nn_3} g^{(-)}_{n'n_3} - g^{(+)}_{nn_3} f^{(-)}_{n'n_3}\Big) \int_0^\infty dq\, \sqrt{q}\, R_{nm_0}(q) R_{n'\, m_0+1}(q)
\end{aligned}$$

原子核全体では ($n_3 = \mathrm{even}$)

$$
\begin{aligned}
\mu &= g_\ell M \int d^3r\, r\, J_\varphi(\boldsymbol{r}) \\
&= g_\ell M \sum_{nn_3} J_{nn_3} \int d^3r\, r\, R_{n\,1}(2q)\phi_{n_3}(\sqrt{2}\zeta) \\
&= 2\pi\, g_\ell M b_0^3 b \sum_{nn_3} J_{nn_3} \int_0^\infty dq\, \sqrt{q}\, R_{n1}(2q) \int_0^\infty d\zeta\, \phi_{n_3}(\sqrt{2}\zeta) \\
&= 2\pi\, g_\ell M b_0^3 b \sum_{nn_3} J_{nn_3} N_{n_3} \sqrt{\frac{2}{n+1}} \int_0^\infty dq\, e^{-q} q\, L_n^{(1)}(2q) \int_0^\infty d\zeta\, e^{-\zeta^2} H_{n_3}(\sqrt{2}\zeta)
\end{aligned}
$$

5.6　付録

(5.2) の導出

2 次元等方調和振動子

$$
-\frac{\hbar^2}{2M}\left(\partial_x^2 + \partial_y^2\right) + \frac{1}{2}M\omega^2\left(x^2+y^2\right) = -\frac{\hbar^2}{2M}\left(\frac{1}{r}\partial_r r \partial_r + \frac{1}{r^2}\partial_\varphi^2\right) + \frac{1}{2}M\omega^2 r^2
$$

固有関数を $R(r)\, e^{im\varphi}/\sqrt{2\pi}$ とおくと

$$
\left[-\frac{\hbar^2}{2M}\left(\frac{1}{r}\partial_r r \partial_r - \frac{m^2}{r^2}\right) + \frac{1}{2}M\omega^2 r^2\right] R = E\, R
$$

ここで

$$
q = \frac{r^2}{b^2}\,, \qquad b = \sqrt{\frac{\hbar}{M\omega}}
$$

とすると

$$
\left(4\partial_q q\, \partial_q - \frac{m^2}{q} - q + \frac{2E}{\hbar\omega}\right) R = 0
$$

になる。$q \to 0,\ q \to \infty$ における漸近形を考慮して

$$
R = q^{|m|/2} e^{-q/2} F
$$

とすると

$$
\begin{aligned}
\partial_q R &= \frac{1}{2} q^{|m|/2} e^{-q/2}\left(\frac{|m|}{q} - 1 + 2\partial_q\right) F \\
4\partial_q q\, \partial_q R &= q^{|m|/2} e^{-q/2}\left(\frac{|m|}{q} - 1 + 2\partial_q\right) q \left(\frac{|m|}{q} - 1 + 2\partial_q\right) F \\
&= q^{|m|/2} e^{-q/2}\left(4q\partial_q^2 + 4\left(|m|+1-q\right)\partial_q - 2(|m|+1) + q + \frac{m^2}{q}\right) F
\end{aligned}
$$

したがって

$$
\left(q\,\partial_q^2 + (|m|+1-q)\,\partial_q + \frac{E}{2\hbar\omega} - \frac{|m|+1}{2}\right) F = 0
$$

Laguerre の多項式 $L_n^{(\alpha)}(q)$ は

$$
\Big(q\,\partial_q^2 + (\alpha+1-q)\,\partial_q + n\Big) L_n^{(\alpha)}(q) = 0 \tag{5.12}
$$

満たすから, 2 次元等方調和振動子の固有関数は

$$\frac{\sqrt{2}}{b}\,R_{nm}(q)\,\frac{e^{im\varphi}}{\sqrt{2\pi}}\,,\qquad R_{nm}(q)=N_{nm}\,q^{|m|/2}e^{-q/2}L_n^{(|m|)}(q)$$

になる。

(5.4), (5.5) の導出

$$\begin{aligned}C_{nm\,n'm'}&=\int_0^\infty dq\,R_{nm}\left(\partial_r+\frac{m'}{r}\right)R_{n'm'}=\frac{1}{b}\int_0^\infty dq\,q^{-1/2}\,R_{nm}\left(2q\frac{d}{dq}+m'\right)R_{n'm'}\\D_{nm\,n'm'}&=\int_0^\infty dq\,R_{nm}\left(\partial_r-\frac{m'}{r}\right)R_{n'm'}=\frac{1}{b}\int_0^\infty dq\,q^{-1/2}\,R_{nm}\left(2q\frac{d}{dq}-m'\right)R_{n'm'}\end{aligned}$$

を求める。数学公式 III 97 ページ

$$q\frac{dL_n^{(m)}}{dq}=nL_n^{(m)}-(n+m)L_{n-1}^{(m)} \tag{5.13}$$

$$qL_n^{(m)}=(2n+1+m)L_n^{(m)}-(n+1)\,L_{n+1}^{(m)}-(n+m)\,L_{n-1}^{(m)} \tag{5.14}$$

を使うと ($n=0$ のときは $L_{n-1}^{(m)}=0$ とすれば成立)

$$\begin{aligned}2q\frac{dR_{nm}}{dq}&=2\,N_{nm}q\frac{d}{dq}\,q^{|m|/2}e^{-q/2}L_n^{(|m|)}(q)\\&=N_{nm}\,q^{|m|/2}e^{-q/2}\left(|m|-q+2q\frac{d}{dq}\right)L_n^{(|m|)}(q)\\&=N_{nm}\,q^{|m|/2}e^{-q/2}\left((n+1)L_{n+1}^{(|m|)}-L_n^{(|m|)}-(n+|m|)L_{n-1}^{(|m|)}\right)\end{aligned} \tag{5.15}$$

であるから

$$\begin{aligned}C_{nm\,n'm'}=\frac{N_{nm}N_{n'm'}}{b}&\int dq\,e^{-q}q^{(|m|+|m'|-1)/2}\\&L_n^{(|m|)}\left((n'+1)L_{n'+1}^{(|m'|)}+(m'-1)L_{n'}^{(|m'|)}-(n'+|m'|)L_{n'-1}^{(|m'|)}\right)\end{aligned}$$

$m\geq 0$ のとき $m'=m+1>0$ であるから

$$\begin{aligned}C_{nm\,n'm'}=\frac{N_{nm}N_{n'm'}}{b}&\int dq\,e^{-q}q^mL_n^{(m)}\\&\left((n'+1)L_{n'+1}^{(m+1)}+mL_{n'}^{(m+1)}-(n'+m+1)L_{n'-1}^{(m+1)}\right)\end{aligned} \tag{5.16}$$

ここで

$$L_n^{(\alpha)}=\sum_{k=0}^n\frac{\Gamma(\alpha-\beta+k)}{k!\,\Gamma(\alpha-\beta)}L_{n-k}^{(\beta)}$$

を使うと

$$L_n^{(m+1)}=\sum_{k=0}^nL_k^{(m)} \tag{5.17}$$

になるから

$$
\begin{aligned}
C_{nm\,n'm'} &= \frac{N_{nm}N_{n'm'}}{b}\int dq\, e^{-q}q^m L_n^{(m)}\Big((n'+1)\sum_{k=0}^{n'+1}L_k^{(m)} + m\sum_{k=0}^{n'}L_k^{(m)} \\
&\qquad\qquad - (n'+m+1)\sum_{k=0}^{n'-1}L_k^{(m)}\Big) \\
&= \frac{N_{nm}N_{n'm'}}{b}\frac{(n+m)!}{n!}\Big((n'+1)\sum_{k=0}^{n'+1}\delta_{kn} + m\sum_{k=0}^{n'}\delta_{kn} - (n'+m+1)\sum_{k=0}^{n'-1}\delta_{kn}\Big) \\
&= \frac{1}{b}\frac{N_{n'm'}}{N_{nm}}\Big((n'+1)\delta_{n'\,n-1} + (n'+1+m)\delta_{n'n}\Big) \qquad (5.18) \\
&= \frac{1}{b}\Big(\sqrt{n}\,\delta_{n'\,n-1} + \sqrt{n+m+1}\,\delta_{n'n}\Big)
\end{aligned}
$$

$m<0$ のとき $m'=m+1\le 0$ であるから $p=-m'=-m-1$ とおくと

$$
\begin{aligned}
C_{nm\,n'm'} &= \frac{N_{nm}N_{n'm'}}{b}\int dq\, e^{-q}q^p L_n^{(p+1)}\Big((n'+1)L_{n'+1}^{(p)} - (p+1)L_{n'}^{(p)} - (n'+p)L_{n'-1}^{(p)}\Big) \\
&= \frac{N_{nm}N_{n'm'}}{b}\sum_{k=0}^{n}\frac{(p+k)!}{k!}\Big((n'+1)\delta_{k\,n'+1} - (p+1)\delta_{k\,n'} - (n'+p)\delta_{k\,n'-1}\Big)
\end{aligned}
$$

$n<n'-1$ のとき 0 になる。また, $n\ge n'+1$

$$
\sum_{k=0}^{n}\cdots = \frac{(p+n'+1)!}{(n'+1)!}(n'+1) - \frac{(p+n')!}{n'!}(p+1) - \frac{(p+n'-1)!}{(n'-1)!}(n'+p) = 0
$$

したがって

$$
\begin{aligned}
C_{nm\,n'm'} &= -\frac{N_{nm}N_{n'm'}}{b}\left(\frac{(p+n'+1)!}{n'!}\,\delta_{n'n} + \frac{(p+n')!}{(n'-1)!}\,\delta_{n'\,n+1}\right) \qquad (5.19) \\
&= -\frac{N_{nm}N_{n'm'}}{b}\frac{(n-m)!}{n!}\Big(\delta_{n'\,n+1} + \delta_{n'n}\Big) \\
&= -\frac{1}{b}\Big(\sqrt{n+1}\,\delta_{n'\,n+1} + \sqrt{n-m}\,\delta_{n'n}\Big)
\end{aligned}
$$

次に

$$
\begin{aligned}
D_{nm\,n'm'} &= \frac{N_{nm}N_{n'm'}}{b}\int dq\, e^{-q}q^{(|m|+|m'|-1)/2} \\
&\qquad L_n^{(|m|)}\Big((n'+1)L_{n'+1}^{(|m'|)} - (m'+1)L_{n'}^{(|m'|)} - (n'+|m'|)L_{n'-1}^{(|m'|)}\Big)
\end{aligned}
$$

$m'\ge 0$ のとき $m=m'+1>0$ であるから

$$
D_{nm\,n'm'} = \frac{N_{nm}N_{n'm'}}{b}\int dq\, e^{-q}q^{m'} L_n^{(m'+1)}\Big((n'+1)L_{n'+1}^{(m')} - (m'+1)L_{n'}^{(m')} - (n'+m')L_{n'-1}^{(m')}\Big)
$$

これは (5.19) で $p=m'$ とすればよいから

$$
D_{nm\,n'm'} = -\frac{1}{b}\Big(\sqrt{n'}\,\delta_{n'\,n+1} + \sqrt{n'+m'+1}\,\delta_{n'n}\Big)
$$

$m'<0$ のとき $p=|m|=-m=-m'-1$ とおくと

$$
D_{nm\,n'm'} = \frac{N_{nm}N_{n'm'}}{b}\int dq\, e^{-q}q^p L_n^{(p)}\Big((n'+1)L_{n'+1}^{(p+1)} + pL_{n'}^{(p+1)} - (n'+p+1)L_{n'-1}^{(p+1)}\Big)
$$

(5.16) で $m=p$ とおけば

$$
\begin{aligned}
D_{nm\,n'm'} &= \frac{N_{nm}N_{n'm'}}{b}\frac{(n+p)!}{n!}\Big((n'+1)\delta_{n'\,n-1}+(n'+1+p)\delta_{n'n}\Big) \\
&= \frac{N_{nm}N_{n'm'}}{b}\frac{(n'-m')!}{n'!}\Big(\delta_{n'\,n-1}+\delta_{n'n}\Big) \\
&= \frac{1}{b}\Big(\sqrt{n}\,\delta_{n'\,n-1}+\sqrt{n-m+1}\,\delta_{n'n}\Big)
\end{aligned}
$$

(5.8) の導出

φ に依存しない関数の場合

$$
\boldsymbol{\nabla}^2 = \frac{1}{r}\partial_r r\partial_r + \partial_z^2 = \frac{4}{b_m^2}\partial_{q'}q'\partial_{q'} + \frac{1}{b_{m3}^2}\partial_{\zeta'}^2
$$

である。ここである m ($m>0$) に対して

$$
|nn_3\rangle = \sqrt{\frac{2}{b_m^2 b_{m3}}}\,R_{nm}(q')\,\phi_{n_3}(\zeta')\,, \quad R_{nm}=N_{nm}\,e^{-q'/2}q'^{m/2}L_n^{(m)}(q')\,, \quad \phi_n = N_n\,e^{-\zeta'^2/2}H_n(\zeta')
$$

とすると

$$
-\langle nn_3|\frac{1}{r}\partial_r r\partial_r|n'n_3'\rangle = -\,\delta_{n_3n_3'}\frac{4}{b_m^2}\int_0^\infty dq\,R_{nm}\partial_q q\partial_q R_{n'm}
$$

(5.14), (5.15) から $m>0$ のとき

$$
\begin{aligned}
\partial_q q\partial_q R_{nm} &= N_{nm}q^{m/2}e^{-q/2}\left(q\frac{d^2L_n^{(m)}}{dq^2}+(m+1-q)\frac{dL_n^{(m)}}{dq}+\frac{1}{4}\left(\frac{m^2}{q}+q-2(m+1)\right)L_n^{(m)}\right) \\
&= \frac{N_{nm}}{4}q^{m/2}e^{-q/2}\left(\frac{m^2}{q}+q-2(m+1)-4n\right)L_n^{(m)} \\
&= \frac{N_{nm}}{4}q^{m/2}e^{-q/2}\left(\frac{m^2}{q}L_n^{(m)}-(2n+m+1)L_n^{(m)}-(n+1)L_{n+1}^{(m)}-(n+m)L_{n-1}^{(m)}\right)
\end{aligned}
$$

である。したがって

$$
\begin{aligned}
4\int_0^\infty dq\,R_{nm}\partial_q q\partial_q R_{n'm} &= N_{nm}N_{n'm}\int_0^\infty dq\,e^{-q}q^m L_n^{(m)}\left(\frac{m^2}{q}L_{n'}^{(m)}-(2n'+m+1)L_{n'}^{(m)}\right. \\
&\qquad\left.-(n'+1)L_{n'+1}^{(m)}-(n'+m)L_{n'-1}^{(m)}\right) \\
&= -\frac{N_{n'm}}{N_{nm}}\Big((2n+m+1)\delta_{nn'}+(n'+1)\delta_{n\,n'+1}+(n'+m)\delta_{n\,n'-1}\Big)+m^2c_{nn'} \\
&= -\,(2n+m+1)\delta_{nn'}-\sqrt{n(n+m)}\,\delta_{n\,n'+1}-\sqrt{n'(n'+m)}\,\delta_{n\,n'-1}+m^2c_{nn'}
\end{aligned}
$$

ただし

$$
c_{nn'} = N_{nm}N_{n'm}\int_0^\infty dq\,e^{-q}q^{m-1}L_n^{(m)}L_{n'}^{(m)}
$$

である。(5.17) より

$$
c_{nn'} = N_{nm}N_{n'm}\sum_{k=0}^{n}\sum_{k'=0}^{n'}\int_0^\infty dq\,e^{-q}q^{m-1}L_k^{(m-1)}L_{k'}^{(m-1)} = N_{nm}N_{n'm}\sum_{k=0}^{n_<}\frac{(k+m-1)!}{k!}
$$

以上から

$$
\begin{aligned}
&-\langle nn_3|\frac{1}{r}\partial_r r\partial_r|n'n_3'\rangle \\
&=\frac{\delta_{n_3n_3'}}{b_m^2}\Big((2n+m+1)\delta_{nn'}+\sqrt{n(n+m)}\,\delta_{n\,n'+1}+\sqrt{n'(n'+m)}\,\delta_{n\,n'-1}-m^2c_{nn'}\Big)
\end{aligned}
$$

になる。

次に (5.3) から

$$
\begin{aligned}
\partial_z^2\phi_{n_3}(q_3)&=\frac{1}{b_{m3}^2}\,\partial_{q_3}^2\phi_{n_3}(q_3)\\
&=\frac{1}{b_{m3}^2}\left(\frac{\sqrt{n_3(n_3-1)}}{2}\,\phi_{n_3-2}-\frac{2n_3+1}{2}\,\phi_{n_3}+\frac{\sqrt{(n_3+1)(n_3+2)}}{2}\,\phi_{n_3+2}\right)
\end{aligned}
$$

であるから

$$
-\langle nn_3|\partial_{q_3}^2|n'n_3'\rangle=\frac{\delta_{nn'}}{b_{m3}^2}\left(\frac{2n_3+1}{2}\delta_{n_3n_3'}-\frac{\sqrt{(n_3+1)n_3'}}{2}\delta_{n_3\,n_3'-2}-\frac{\sqrt{(n_3'+1)n_3}}{2}\delta_{n_3\,n_3'+2}\right)
$$

したがって

$$
\begin{aligned}
\langle nn_3|\left(-\boldsymbol{\nabla}^2+m_{\mathrm{b}}^2\right)|n'n_3'\rangle=&\left(\frac{2n+m+1}{b_m^2}+\frac{n_3+1/2}{b_{m3}^2}+m_{\mathrm{b}}^2\right)\delta_{nn'}\delta_{n_3n_3'}\\
&+\frac{\delta_{n_3n_3'}}{b_m^2}\Big(\sqrt{n(n+m)}\,\delta_{n\,n'+1}+\sqrt{n'(n'+m)}\,\delta_{n+1\,n'}-m^2c_{nn'}\Big)\\
&-\frac{\delta_{nn'}}{b_{m3}^2}\left(\frac{\sqrt{(n_3+1)n_3'}}{2}\,\delta_{n_3\,n_3'-2}+\frac{\sqrt{(n_3'+1)n_3}}{2}\,\delta_{n_3\,n_3'+2}\right)
\end{aligned}
$$

$H(n,\,n';\,n'')$ の解析的表現

Bateman Vol.II の 195 ページ (37), (38) から

$$
H_n(\sqrt{2}\,x)=2^{n/2}n!\sum_{k=0}^{[n/2]}\frac{H_{n-2k}(x)}{2^k\,k!\,(n-2k)!}
$$

になる。数学大公式集 (丸善)838 ページ 7.375 から $t=(k+m+n)/2$ が整数のとき

$$
\int_{-\infty}^{\infty}dx\,e^{-2x^2}\,H_k(x)H_m(x)H_n(x)=\frac{2^t}{\sqrt{2}\,\pi}\Gamma(t-k+\tfrac{1}{2})\Gamma(t-m+\tfrac{1}{2})\Gamma(t-n+\tfrac{1}{2})
$$

である。したがって

$$
\begin{aligned}
&H(n,\,n';\,m)\\
&=N_nN_{n'}N_m\int_{-\infty}^{\infty}dx\,e^{-2x^2}H_n(x)H_{n'}(x)H_m(\sqrt{2}x)\\
&=N_nN_{n'}N_m2^{m/2}m!\sum_{k=0}^{[m/2]}\frac{1}{2^k\,k!\,(m-2k)!}\int_{-\infty}^{\infty}dx\,e^{-2x^2}H_n(x)H_{n'}(x)H_{m-2k}(x)\\
&=N_nN_{n'}N_m\frac{2^{s+m/2}m!}{2\pi}\sum_{k=0}^{[m/2]}\frac{\Gamma(s-k-n)\Gamma(s-k-n')\Gamma(s+k-m)}{2^{2k}k!\,(m-2k)!}\\
&=N_nN_{n'}N_m\frac{2^{s+m/2}}{2\pi^{3/2}}\sum_{k=0}^{[m/2]}{}_m\mathrm{C}_{2k}\Gamma(k+\tfrac{1}{2})\Gamma(s-k-n)\Gamma(s-k-n')\Gamma(s+k-m)
\end{aligned}
$$

ただし $s=(n+n'+m+1)/2$