

正誤表1 本質的な修正でなくとも、重版に際して修正した箇所を含む

修正番号	頁	行・見出し番号	誤 (修正箇所)	正 (修正・加筆方法)
1	11	12行目, 13行目	Schödinger	Schrödinger
		(1.30) 式 1,2行目	$\psi_i$	$\psi_i(\mathbf{r})$
2	37	(3.17) 式 1行目	定積分の上端が「 $\theta$ 」となっているものを「 $\pi$ 」に修正 (2箇所)	
3	80	式を含めて 下から5行目	ライプニッツ <b>Leibniz</b> の公式	ライプニッツ こうしき <b>Leibniz</b> の公式
4	85	(8.8) 式	$\frac{(8.2) \text{ 式}}{(8.1) \text{ 式}}$	$\frac{(8.2) \text{ 式}}{(8.1) \text{ 式}}$
5	120	式を含めて8行目	<p>「<math>\sim</math>の定数倍) が得られた。」の末尾に以下の脚注を追加*1          なお、本項では「球面調和関数に昇降演算子を作用させると、量子数 <math>m</math> の異なる球面調和関数が得られる」ということを確認するのが目的であるが、この目的のためには球面調和関数を、<math>Y_{\ell,m}(\theta, \phi) := (-1)^{(m+ m )/2} \Theta_{\ell,m}(\theta) \Phi_m(\phi)</math> と「符号を調節する係数 <math>(-1)^{(m+ m )/2}</math>」を入れて定義するとより良い。ただし、このように定義した場合、<math>Y_{p_x}</math> と <math>Y_{p_y}</math> を球面調和関数の線形結合で表すと、その表し方が本書と異なり、<math>Y_{p_x} = (Y_{1,-1} - Y_{1,1})/\sqrt{2}</math>, <math>Y_{p_y} = (Y_{1,-1} + Y_{1,1})i/\sqrt{2}</math> となる。</p>	
6	123	(9.112) 式 4行目	$\sum_{n=1}^{\infty}$ (4箇所)	$\sum_{n=0}^{\infty}$ (4箇所)
			$2(\ell+1)b_1$	削除
			$2[1 - (\ell+1)\sqrt{-\eta}] b_0$	削除
		(9.112) 式 5行目	$\sum_{n=1}^{\infty}$ (1箇所)	$\sum_{n=0}^{\infty}$ (1箇所)
			$2(\ell+1)b_1 + 2[1 - (\ell+1)\sqrt{-\eta}] b_0$	削除
	124	1~4行	<p>該当する4行を下記のように変更          2行目から3行目への式変形において、2行目第1項と第3項は <math>n \rightarrow n-1</math> への書き換えを行った。これに伴い、和の範囲は <math>n=0 \sim \infty</math> から <math>n=1 \sim \infty</math> に変更されるが、<math>n=0</math> の項を含めても結果は変わらないから、和の範囲を <math>n=0 \sim \infty</math> のままとした。          (9.112) 式が任意の <math>x</math> について成り立つには、左辺の [ ] 内が0でなければならない。これより次式を得る。</p>	
		(9.118) 式	$n_r$ に 1,2,3,... を代入した	$n_r$ に 0,1,2,... を代入した
↑の説明が見にくい場合は、修正追加資料1をご覧ください				
7	144	枠囲みから 上に2行目	パウリのはいたりつ <b>Pauli</b> の排他律	パウリ はいたりつ <b>Pauli</b> の排他律
8	257	下から5行目	行頭の「,」を上を行末に移動	
9	404	(C.35) 式の次の行	$\sim$ と呼ぶ。	$\sim$ とよぶ。

すなわち、1刷と2刷では、11, 37, 80, 85, 120, 121, 123, 124, 144, 257, 404 頁が異なる。

\*1 この脚注を追加することにより、2刷では121頁の脚注が\*10から\*11へ、123頁の脚注が\*11から\*12へ変更になる。

修正 6 について

訂正が多くの箇所にあぶるので、次の資料を準備しました。こちらの方が、修正がしやすいかもしれません。

修正追加資料 1

と計算されるから、これらを (9.108) 式に代入して整理しよう。

$$\begin{aligned}
 & x \underbrace{\sum_{n=0}^{\infty} (n+1)(n+2)b_{n+2}x^n}_{(9.111)} + 2(\ell+1-x\sqrt{-\eta}) \underbrace{\sum_{n=0}^{\infty} (n+1)b_{n+1}x^n}_{(9.110) \text{ 式}} + 2\left[1-(\ell+1)\sqrt{-\eta}\right] \underbrace{\sum_{n=0}^{\infty} b_n x^n}_{(9.109) \text{ 式}} = 0 \\
 & \sum_{n=0}^{\infty} (n+1)(n+2)b_{n+2}x^{n+1} + \sum_{n=0}^{\infty} (n+1)2(\ell+1)b_{n+1}x^n - \sum_{n=0}^{\infty} 2\sqrt{-\eta}(n+1)b_{n+1}x^{n+1} \\
 & \quad + \sum_{n=0}^{\infty} 2\left[1-(\ell+1)\sqrt{-\eta}\right]b_n x^n = 0 \\
 & \sum_{n=0}^{\infty} n(n+1)b_{n+1}x^n + \left( \underbrace{2(\ell+1)b_1}_{\text{削除}} + \sum_{n=0}^{\infty} (n+1)2(\ell+1)b_{n+1}x^n \right) - \sum_{n=0}^{\infty} 2\sqrt{-\eta}nb_n x^n \\
 & \quad + \left( \underbrace{2\left[1-(\ell+1)\sqrt{-\eta}\right]b_0}_{\text{削除}} + \sum_{n=0}^{\infty} 2\left[1-(\ell+1)\sqrt{-\eta}\right]b_n x^n \right) = 0 \\
 & \sum_{n=0}^{\infty} x^n \left[ (n+1)(n+2\ell+2)b_{n+1} + 2\left[1-(\ell+1+n)\sqrt{-\eta}\right]b_n \right] \\
 & \quad + \underbrace{2(\ell+1)b_1 + 2\left[1-(\ell+1)\sqrt{-\eta}\right]b_0}_{\text{削除}} = 0 \tag{9.112}
 \end{aligned}$$

2 行目から 3 行目への書き換えでは、和の範囲を  $n=0$  から  $n=1$  に変更した。その際、2 行目第 1 項と第 3 項は  $n \rightarrow n-1$  への書き換えを行い、2 項目と 4 項目は  $n=0$  の項を外に出した。(9.112) 式が任意の  $x$  について成り立つには、左辺第 1 項の [ ] 内と第 2 項がそれぞれ 0 でなければならない。前者から次式を得る。

2 行目から 3 行目への式変形において、2 行目第 1 項と第 3 項は  $n \rightarrow n-1$  への書き換えを行った。これに伴い、和の範囲は  $n=0 \sim \infty$  から  $n=1 \sim \infty$  に変更されるが、 $n=0$  の項を含めても結果は変わらないから、和の範囲を  $n=0 \sim \infty$  のままとした。(9.112) 式が任意の  $x$  について成り立つには、左辺の [ ] 内が 0 でなければならない。これより次式を得る。

## 修正 5 に関して

120 頁には「水素原子の球面調和関数  $Y_{\ell,m}$  に角運動量の昇降演算子を作用させると、 $m$  の値が 1 つずれた球面調和関数の定数倍を得る」とする記述があります。これに関し、

- この議論をする場合は、球面調和関数の定義に「符号を調節する係数  $(-1)^{(m+|m|)/2}$ 」を入れなくてはならない。
- この「符号を調節する係数  $(-1)^{(m+|m|)/2}$ 」を入れた場合と入れない場合では、 $Y_{p_x}$  と  $Y_{p_y}$  を球面調和関数の線形結合で表すときの係数が異なるので、他書と比較して読んだとき初学者は混乱するのでは。

との批判を受けました。指摘のとおり、球面調和関数に昇降演算子を作用させて、量子数  $m$  の異なる球面調和関数を得るには、球面調和関数を、

$$Y_{\ell,m}(\theta, \phi) := (-1)^{(m+|m|)/2} \Theta_{\ell,m}(\theta) \Phi_m(\phi)$$

と「符号を調節する係数」を入れて定義しなければなりません（もしくは文献 [1] のように脚注でコメントする必要がある）。拙著では、これを図 9.18 のキャプションで「重要でない定数の一部は省略した」ですませました。指摘されてみれば、本当にそのとおりで、非常に不親切な書き方になっています\*2。そこで、以上をふまえて正誤表にある文章を追加することに致しました。

\*2 ただし、このようにしたのは理由があつてのことです。2 番目の指摘にあるように、この係数をつけて球面調和関数を定義すると、 $Y_{p_x}$  と  $Y_{p_y}$  を球面調和関数の線形結合で表す箇所（105 頁～106 頁の (9.50) 式と (9.51) 式）を、

$$\begin{aligned} \frac{i}{\sqrt{2}} (Y_{1,1} + Y_{1,-1}) &= \frac{i}{\sqrt{2}} \left( -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{i\phi} + \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{-i\phi} \right) = \frac{-i}{\sqrt{2}} \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta (e^{i\phi} - e^{-i\phi}) \\ &= \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \sin \theta \sin \phi && \text{(C.55) 式より} \\ &= \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cdot \frac{y}{r} && \text{(8.2) 式を代入した} \\ \frac{-1}{\sqrt{2}} (Y_{1,1} - Y_{1,-1}) &= \frac{-1}{\sqrt{2}} \left( -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{i\phi} - \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{-i\phi} \right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta (e^{i\phi} + e^{-i\phi}) && -\frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta \text{でくくった} \\ &= \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \sin \theta \cos \phi && \text{(C.54) 式より} \\ &= \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cdot \frac{x}{r} && \text{(8.1) 式を代入した} \end{aligned}$$

と変更する必要があります（変更箇所は赤字で示した）。文献 [24] はこのやり方です。しかし、このように球面調和関数を定義している教科書は（少なくとも私の見たものでは）少なく、係数を含めないのが普通のやり方であるとの判断から、拙著では係数を含めない定義を採用しました。そこで、昇降演算子を球面調和関数に作用させると  $m$  が 1 つずれた球面調和関数を得ることを示す際に、「重要でない定数の一部は省略した」と表記したわけです。係数まで一致することを示さなければこの議論には意味が無いという意見もあるかもしれませんが、球面調和関数に昇降演算子を作用させて、関数の形が明らかに変化し、その関数が  $m$  の値が 1 つずれた球面調和関数の定数倍だということを示すだけでも一定の意味はあると考えています。たしかに、文献 [24] のように、係数を含めた球面調和関数で統一するのがもっとも首尾一貫しているのは間違いありません。ただし、厳密にやろうとすると、文献 [24] にあるように、球面調和関数の定義に「符号を調節する係数  $(-1)^{(m+|m|)/2}$ 」を入れ、球面調和関数に昇降演算子を作用させた結果、 $m$  の値が 1 つずれた球面調和関数を定数倍したものが得られること、さらにこの定数が  $\sqrt{\ell(\ell+1) - m(m\pm 1)}\hbar$  であることを示す必要があります（文献 [24] はこれを全て示しています）。私は、この定数が  $\sqrt{\ell(\ell+1) - m(m\pm 1)}\hbar$  であることを示すことまではしないという判断のもと、そうであれば球面調和関数の定義に「符号を調節する係数」を入れる必要も無いと考え、「ただし、重要でない定数の一部は省略した」と記述しました。しかし、この一文に以上の意味を持たせるのは、非常に不親切であることには間違いありません。

なお、球面調和関数に昇降演算子を作用させると  $m$  の値が1つずれた球面調和関数の定数倍になることの厳密な取り扱い、すこし長くなるので次にまとめました。

#### 9.12.4 球面調和関数に昇降演算子を作用させる への補足

9.12.4 項では、昇降演算子を球面調和関数に作用させると  $m$  の値が1つずれた球面調和関数の定数倍が得られると記述するにとどめ、定数がいくつなのかという詳しい記述はしていません。ここでは、この定数がいくつなのかについての説明を書きます。

結論をはじめに述べれば、この定数は  $\sqrt{\ell(\ell+1) - m(m\pm 1)}\hbar$  となります。すなわち、球面調和関数に昇降演算子を作用させると、次の関係が成り立ちます。

$$\hat{\ell}_{\pm} Y_{\ell,m} = \sqrt{\ell(\ell+1) - m(m\pm 1)}\hbar Y_{\ell,m\pm 1} \quad (\text{i})$$

ただし、この場合は球面調和関数を  $Y_{\ell,m}(\theta, \phi) := (-1)^{(m+|m|)/2} \Theta_{\ell,m}(\theta) \Phi_m(\phi)$  と「符号を調節する係数  $(-1)^{(m+|m|)/2}$ 」を入れて定義しなければならず、本文中の定義と少し異なります。

$\hat{\ell}_{\pm} Y_{\ell,m} = \sqrt{\ell(\ell+1) - m(m\pm 1)}\hbar Y_{\ell,m\pm 1}$  の証明\*3

球面調和関数  $Y_{\ell,m}$  に  $\hat{\ell}_+$ ,  $\hat{\ell}_-$  を作用させて得られる関数を  $A_{\pm}$  とおく。

$$A_{\pm} = \hat{\ell}_{\pm} Y_{\ell,m} \quad (\text{ii})$$

ここで、 $\hat{\ell}_z$  と  $\hat{\ell}_{\pm}$  の交換関係：(9.78) 式、(9.79) 式より、次の関係を得る。

$$\begin{aligned} \hat{\ell}_z \hat{\ell}_{\pm} Y_{\ell,m} - \hat{\ell}_{\pm} \hat{\ell}_z Y_{\ell,m} &= \pm \hbar \hat{\ell}_{\pm} Y_{\ell,m} \\ \underbrace{\hat{\ell}_{\pm} \hat{\ell}_{\pm} Y_{\ell,m}}_{=A_{\pm}} &= \hat{\ell}_{\pm} \hat{\ell}_z Y_{\ell,m} \pm \hbar \hat{\ell}_{\pm} Y_{\ell,m} \quad \text{移項した} \\ \hat{\ell}_z A_{\pm} &= \hat{\ell}_{\pm} (\hat{\ell}_z \pm \hbar) Y_{\ell,m} \quad \hat{\ell}_{\pm} \text{でくくった} \\ &= \hat{\ell}_{\pm} (m \pm 1) \hbar Y_{\ell,m} \quad (9.81) \text{ 式より} \\ &= (m \pm 1) \hbar \hat{\ell}_{\pm} Y_{\ell,m} \quad (m \pm 1) \hbar \text{ は定数だから} \\ &= (m \pm 1) \hbar A_{\pm} \quad (\text{ii}) \text{ 式より} \end{aligned} \quad (\text{iii})$$

次に、 $A_{\pm}$  に  $\hat{\ell}^2$  を作用させよう。

$$\begin{aligned} \hat{\ell}^2 A_{\pm} &= \hat{\ell}^2 (\hat{\ell}_x \pm i\hat{\ell}_y) Y_{\ell,m} \quad (\text{ii}), (9.75), (9.76) \text{ 式より} \\ &= (\hat{\ell}_x \pm i\hat{\ell}_y) \hat{\ell}^2 Y_{\ell,m} \quad (2.12) \text{ 式より} \\ &= \hat{\ell}_{\pm} \ell(\ell+1) \hbar^2 Y_{\ell,m} \quad (9.66), (9.67) \text{ 式より} \\ &= \ell(\ell+1) \hbar^2 \hat{\ell}_{\pm} Y_{\ell,m} \quad \ell(\ell+1) \hbar^2 \text{ は定数だから} \\ &= \ell(\ell+1) \hbar^2 A_{\pm} \quad (\text{ii}) \text{ 式より} \end{aligned} \quad (\text{iv})$$

\*3 この証明は、文献 [24] を参照した。

(iii) 式と (iv) 式は,  $A_{\pm}$  が  $\hat{\ell}_z$  と  $\hat{\ell}^2$  の共通の固有関数であり, 固有値はそれぞれ  $(m \pm 1)\hbar$  と  $\ell(\ell + 1)\hbar^2$ であることを示している。ところで,  $Y_{\ell, m \pm 1}$  に対する  $\hat{\ell}_z$  の固有値も  $(m \pm 1)\hbar$  であるから,  $A_{\pm}$  は  $Y_{\ell, m \pm 1}$  と定数倍しか変わらないことがわかる。この定数倍を  $C_{\ell, m}^{\pm}$  とすると,

$$\begin{aligned} A_{\pm} &= \hat{\ell}_{\pm} Y_{\ell, m} \\ &= C_{\ell, m}^{\pm} Y_{\ell, m \pm 1} \end{aligned} \quad (\text{v})$$

が成り立つ。(v) 式の 1 行目と 2 行目の等式は重要だから, あらためて書いておこう。

$$\hat{\ell}_+ Y_{\ell, m} = C_{\ell, m}^+ Y_{\ell, m+1} \quad (\text{vi})$$

$$\hat{\ell}_- Y_{\ell, m} = C_{\ell, m}^- Y_{\ell, m-1} \quad (\text{vii})$$

まずは  $C_{\ell, m}^+$  を求めよう。このために, まずは  $\hat{\ell}_- \hat{\ell}_+$  を  $Y_{\ell, m}$  に作用させてみよう ( $C_{\ell, m}^-$  を求めるときは,  $\hat{\ell}_+ \hat{\ell}_-$  を  $Y_{\ell, m}$  に作用させることから始めればよい)。

$$\begin{aligned} \hat{\ell}_- \hat{\ell}_+ Y_{\ell, m} &= (\hat{\ell}_x - i\hat{\ell}_y) (\hat{\ell}_x + i\hat{\ell}_y) Y_{\ell, m} && (9.75), (9.76) \text{ 式より} \\ &= (\hat{\ell}_x^2 + \hat{\ell}_y^2 + i\hat{\ell}_x \hat{\ell}_y - i\hat{\ell}_y \hat{\ell}_x) Y_{\ell, m} && \text{展開した} \\ &= (\hat{\ell}^2 - \hat{\ell}_z^2 + i[\hat{\ell}_x, \hat{\ell}_y]) Y_{\ell, m} && (2.11) \text{ 式より} \\ &= (\hat{\ell}^2 - \hat{\ell}_z^2 - \hbar \hat{\ell}_z) Y_{\ell, m} && (2.8) \text{ 式より} \\ &= (\ell(\ell + 1)\hbar^2 - (m\hbar)^2 - \hbar(m\hbar)) Y_{\ell, m} && (9.68), (9.72) \text{ 式より} \\ &= (\ell(\ell + 1) - m(m + 1)) \hbar^2 Y_{\ell, m} && \text{整理した} \end{aligned} \quad (\text{viii})$$

ところで, (vi) 式に注目すると, 次の関係を得る。

$$\begin{aligned} \hat{\ell}_- \hat{\ell}_+ Y_{\ell, m} &= \hat{\ell}_- C_{\ell, m}^+ Y_{\ell, m+1} && (\text{vi}) \text{ 式の両辺に左から } \hat{\ell}_- \text{ を作用させた} \\ &= C_{\ell, m}^+ \hat{\ell}_- Y_{\ell, m+1} && C_{\ell, m}^+ \text{ は定数だから} \\ &= C_{\ell, m}^+ C_{\ell, m+1}^- Y_{\ell, m} && \end{aligned} \quad (\text{ix})$$

また, (vi) 式からは次の関係も得られる。

$$\begin{aligned} \hat{\ell}_+ Y_{\ell, m-1} &= C_{\ell, m-1}^+ Y_{\ell, m} && (\text{vi}) \text{ 式で } m \rightarrow m-1 \text{ とした} \\ \int Y_{\ell, m}^* \hat{\ell}_+ Y_{\ell, m-1} dv &= C_{\ell, m-1}^+ \int Y_{\ell, m}^* Y_{\ell, m} dv && \text{両辺に左から } Y_{\ell, m}^* \text{ をかけて積分した} \\ &= C_{\ell, m-1}^+ && Y_{\ell, m} \text{ は規格化済みだから} \end{aligned} \quad (\text{x})$$

一方, (vii) 式からは次の関係を得る。

$$\begin{aligned} \int Y_{\ell, m-1}^* \hat{\ell}_- Y_{\ell, m} dv &= C_{\ell, m}^- \int Y_{\ell, m-1}^* Y_{\ell, m-1} dv && (\text{vii}) \text{ 式の両辺に } Y_{\ell, m-1}^* \text{ をかけて積分した} \\ &= C_{\ell, m}^- && Y_{\ell, m-1} \text{ は規格化済みだから} \end{aligned} \quad (\text{xi})$$

(xi) 式の左辺は次のようにも計算できる。

$$\begin{aligned}
& \int Y_{\ell,m-1}^* \hat{\ell}_- Y_{\ell,m} dv \\
&= \int Y_{\ell,m-1}^* \hat{\ell}_x Y_{\ell,m} dv - i \int Y_{\ell,m-1}^* \hat{\ell}_y Y_{\ell,m} dv && (9.76) \text{ 式より} \\
&= \left( \int Y_{\ell,m}^* \hat{\ell}_x Y_{\ell,m-1} dv \right)^* - i \left( \int Y_{\ell,m}^* \hat{\ell}_y Y_{\ell,m-1} dv \right)^* && \hat{\ell}_x \text{ と } \hat{\ell}_y \text{ は Hermite 演算子だから} \\
&= \left( \int \left[ Y_{\ell,m}^* \hat{\ell}_x Y_{\ell,m-1} + i \left( Y_{\ell,m}^* \hat{\ell}_y Y_{\ell,m-1} \right) \right] dv \right)^* && \text{くくった} \\
&= \left( \int Y_{\ell,m}^* \hat{\ell}_+ Y_{\ell,m-1} dv \right)^* && (9.75) \text{ 式より} \tag{xii}
\end{aligned}$$

(x)式 ~ (xii) 式より, 次の関係を得る。

$$C_{\ell,m}^- = \left( C_{\ell,m-1}^+ \right)^* \tag{xiii}$$

(ix) 式の両辺に  $Y_{\ell,m}^*$  を左からかけて積分すると次の関係を得る。

$$\begin{aligned}
\int Y_{\ell,m}^* \hat{\ell}_- \hat{\ell}_+ Y_{\ell,m} dv &= C_{\ell,m}^+ C_{\ell,m+1}^- \int Y_{\ell,m}^* Y_{\ell,m} dv \\
&= C_{\ell,m}^+ C_{\ell,m+1}^- && Y_{\ell,m} \text{ は規格化済みだから} \\
&= C_{\ell,m}^+ \left( C_{\ell,m}^+ \right)^* && (xiii) \text{ 式より} \\
&= \left| C_{\ell,m}^+ \right|^2 && \tag{xiv}
\end{aligned}$$

(xiv) 式の左辺は (viii) 式を使えば次のようにも表せる。

$$\begin{aligned}
& \int Y_{\ell,m}^* \hat{\ell}_- \hat{\ell}_+ Y_{\ell,m} dv \\
&= (\ell(\ell+1) - m(m+1)) \hbar^2 \int Y_{\ell,m}^* Y_{\ell,m} dv && \text{(viii) 式の両辺に左から } Y_{\ell,m}^* \text{ をかけて積分した} \\
&= (\ell(\ell+1) - m(m+1)) \hbar^2 && Y_{\ell,m} \text{ は規格化済みだから} \tag{xv}
\end{aligned}$$

(xiv) 式と (xv) 式より次の関係を得る。

$$C_{\ell,m}^+ = \sqrt{\ell(\ell+1) - m(m+1)} \hbar \tag{xvi}$$

同様にして次の関係を得る。

$$C_{\ell,m}^- = \sqrt{\ell(\ell+1) - m(m-1)} \hbar \tag{xvii}$$

まとめると,

$$C_{\ell,m}^\pm = \sqrt{\ell(\ell+1) - m(m \pm 1)} \hbar \tag{xviii}$$

以上より,  $\hat{\ell}_\pm Y_{\ell,m} = \sqrt{\ell(\ell+1) - m(m \pm 1)} \hbar Y_{\ell,m \pm 1}$  が証明できた。□