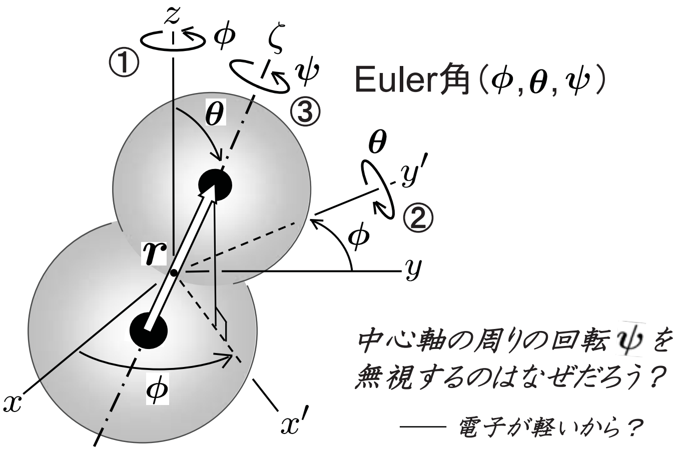
2 原子分子理想気体の比熱（内部自由度の分配関数）　　　　2011/3/10 追補



まず中心軸周りの自転 $\dot{\psi}$ を考慮せずに考える。この場合，分子の回転は 2 原子間の相対運動である。

相対運動としての回転運動 ── 主慣性モーメント $(I, I, 0)$ の剛体棒の問題

相対座標を $\boldsymbol{r}$，換算質量を μ，原子間力ポテンシャルを $V(r)$ として

$$H_1 = \frac{\mu\,\dot{\boldsymbol{r}}^2}{2} + V(r) = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2\mu} + V(r) \tag{1}$$

変位演算子 $i\boldsymbol{p} = \hbar\nabla$ を用いて

$$H_1 = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 + V(r) = -\frac{\hbar^2}{2\mu r^2}\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r} + V(r) + \frac{\boldsymbol{L}^2}{2\mu r^2} \tag{2}$$

最初の 2 項は，$V(r)$ の最小点 $r = r_0$ の周りの微小変動 $s = r - r_0$ だけを考えれば，調和振動子になり，自由度 $f_{\rm vib} = 2$ を与える。ここでは回転の自由度のみを考察するため $r = r_0$（固定）と見なし，ハミルトニアンから除く。角運動量部分は，水素原子の問題でよく知られているように演算子

$$\boldsymbol{L}^2 = -\hbar^2\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right] \tag{3}$$

であり，$I = \mu {r_0}^2$ として固有値 $l(l+1)\hbar^2/2I$ $(l = 0, 1, 2, ...)$ をもつ。以上より回転運動の分配関数は，エネルギーに関与しない L_z の固有値 $m_l = 0, \pm1, \pm2, ..., \pm l$ に関する縮重度 $2l+1$ を考慮して

$$z_1(T) = \sum_{l=0}^{\infty}(2l+1){\rm e}^{-l(l+1)\hbar^2/2IkT} \simeq \int_0^\infty (2l+1){\rm e}^{-l(l+1)\hbar^2/2IkT}\,{\rm d}l = \frac{2IkT}{\hbar^2} \tag{4}$$

となる。近似は $\hbar^2/2I \ll kT$ の**準古典近似**であり，以下の**古典統計**の結果と一致する：

$$\tilde{z}_1(T) = \frac{1}{h^2}\int_0^\pi {\rm d}\theta \int_0^{2\pi}{\rm d}\phi \int_{-\infty}^{\infty}{\rm d}p_\theta \int_{-\infty}^{\infty}{\rm d}p_\phi\,{\rm e}^{-H_1'/kT} = \frac{2IkT}{\hbar^2}\,,\quad H_1' = \frac{{p_\theta}^2}{2I} + \frac{{p_\phi}^2}{2I\sin^2\theta} \tag{5}$$

自転部分：中心軸周りの慣性モーメントを C とし，**方便**として中心軸は (ϕ, θ) 方向で固定されているとすれば

$$H_2 = \frac{{p_\psi}^2}{2C} = -\frac{\hbar^2}{2C}\left(\frac{\partial}{\partial\psi}\right)^2 \tag{6}$$

の固有関数は ${\rm e}^{im\psi}$ $(m = 0, \pm1, \pm2, ...)$ で，固有値は $m^2\hbar^2/2C$ だから

$$z_2(T) = \sum_{m=-\infty}^{\infty}{\rm e}^{-m^2\hbar^2/2CkT} \simeq \int_{-\infty}^{\infty}{\rm e}^{-m^2\hbar^2/2CkT}\,{\rm d}m = \sqrt{\frac{2\pi CkT}{\hbar^2}} \tag{7}$$

近似は $\hbar^2/2C \ll kT$ の準古典近似であり，以下の古典統計と一致する：

$$\tilde{z}_2(T) = \frac{1}{h}\int_0^{2\pi} \mathrm{d}\psi \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{-p_\psi{}^2/2CkT}\, \mathrm{d}p_\psi = \sqrt{\frac{2\pi CkT}{\hbar^2}} \tag{8}$$

剛体の回転運動： ちゃんと主慣性モーメント (I, I, C) の剛体として扱ってみよう。

（古典論） 回転対称な剛体の運動エネルギーから，ハミルトニアンは以下で与えられる：

$$K = \frac{I}{2}(\dot{\theta}^2 + \dot{\phi}^2 \sin^2\theta) + \frac{C}{2}(\dot{\phi}\cos\theta + \dot{\psi})^2 \tag{9}$$

$$p_\theta = I\dot{\theta}\,, \quad p_\phi - p_\psi\cos\theta = I\dot{\phi}\sin^2\theta\,, \quad p_\psi = C(\dot{\phi}\cos\theta + \dot{\psi}) \tag{10}$$

$$H = \frac{1}{2I}\,p_\theta{}^2 + \frac{1}{2I\sin^2\theta}\,(p_\phi - p_\psi\cos\theta)^2 + \frac{1}{2C}\,p_\psi{}^2 \tag{11}$$

古典統計では，ϕ についての積分を先に行えば第 2 項は $p_\phi{}^2$ である場合と同じで，その意味では 2 種類の回転運動は分離される。上の方便はこれに倣ったものである。計算結果は (5) と (8) をあわせた

$$\tilde{z}(T) = \tilde{z}_1(T)\tilde{z}_2(T) = \frac{2IkT}{\hbar^2}\sqrt{\frac{2\pi CkT}{\hbar^2}} \quad \left(\propto \beta^{-3/2}, \ \ \beta = 1/kT\right) \tag{12}$$

となり，C が いくら小さくても エネルギーは等分配され，$U_{\mathrm{rot}} = 3kT/2$（$f_{\mathrm{rot}} = 3$）となる。

電子と原子核の質量比から $C \sim I \times 10^{-3}$ で，離散的なエネルギー準位の量子効果が顕れる目安温度に**千倍**くらい差がある。例えば水素分子では $I \simeq 4.6\times10^{-48}\,\mathrm{kg\,m^2}$，$\hbar^2/2kI \simeq 87\,\mathrm{K}$ であり，常温

$$\hbar^2/2kI \lesssim T \ll \hbar^2/2kC \ \ (\sim 10^5\,\mathrm{K}) \tag{13}$$

の温度範囲では，中心軸の周りの自転 $\dot{\psi}$ は完全に量子論的で励起されず[1]，古典統計ではこれをハミルトニアンに入れて計算してはいけない。つまり，慣性モーメント C（または電子の質量）が小さいから**無視できる**のではなく，**無視しなければならない**のである。その結果，回転の自由度は $f_{\mathrm{rot}} = 2$ となる。常温より少し高めの $10^3\,\mathrm{K}$ 付近では，むしろ最初に除いた原子間の振動の自由度（$f_{\mathrm{vib}} = 2$）の方が融けて効いてきて，さらに温度が上がると分子は分解してしまうであろう。逆に低温

$$T < \hbar^2/2kI \ \ (\sim 10^2\,\mathrm{K}) \tag{14}$$

では，今度は分子の回転運動も量子的に凍りついて**単原子分子的**（$f = 3$）にふるまうようになる。

（量子論） 角運動量ベクトル $\boldsymbol{L}$ を，ある瞬間の剛体に固定された慣性主軸系 (ξ, η, ζ) の成分で表せば，回転の運動エネルギーは主慣性モーメントを (A, B, C) として

$$H = \frac{\hbar^2}{2}\left(\frac{L_\xi{}^2}{A} + \frac{L_\eta{}^2}{B} + \frac{L_\zeta{}^2}{C}\right) \tag{15}$$

で与えられる。ここでは，角運動量は $\hbar$ で割ったものを $\boldsymbol{L}$ としている。一般の場合にこの固有値を求めることは難しい（不可能？）が，**対称コマ**（$A = B$）の場合には簡単に解くことができる。この場合，簡単のため $b = \hbar^2/2B$, $c = \hbar^2/2C$ として，ハミルトニアンを少し変形して

$$H = b\boldsymbol{L}^2 + (c - b)L_\zeta{}^2 \tag{16}$$

と書けば，$\boldsymbol{L}^2$ と L_ζ は**可換**だから同じ固有状態をもつので，別々に固有値を求めればよい。

[1] 全く自転運動がないということではない。僅かな確率（$\sim \mathrm{e}^{-\hbar^2/2CkT}$）で励起されて少々回転しても，エネルギー配分量は $kT/2$ に比べて無視できるという意味。実際，本体の回転と同程度の角速度で自転しても，運動エネルギーは $C\omega^2/2 \ll I\omega^2/2 \sim kT/2$ である。そこまで調べた上でなら「電子が軽いから無視できる」は正しい（負け惜しみ）。

まず $\boldsymbol{L}^2$ は空間固定座標系でも同じだから，その固有値[2] は，$l(l+1)$, $l=0,\,1,\,2,\,...,\,\infty$ であり，エネルギーに関与しない L_z に関する「隠れた」量子数，$m_l=0,\,\pm1,\,\pm2,\,...,\,\pm l$ について，$2l+1$ 重に縮退している。これは z 軸回りの剛体の回転（変数 ϕ）に対応する。

ハミルトニアン (16) の第 2 項は，剛体に固定した慣性主軸系で固有値問題を考えれば，同様に L_ζ に関する量子数，$m=0,\,\pm1,\,\pm2,\,...,\,\pm l$ が求められる。これは，中心軸周りの剛体の自転（変数 ψ）に対応するもので，先程の量子数 m_l とは別のものである。

以上より，エネルギー準位は

$$E_{l,m}=b\,l(l+1)+(c-b)\,m^2\,,\quad l=0,\,1,\,2,\,3,\ldots,\,\infty\,,\ m=0,\,1,\,2,\,\ldots,\,l \tag{17}$$

となる。準位 l は $2l+1$ 重に，準位 $m\,(\neq 0)$ は $\pm$ の符号に関して 2 重に縮退している。[**球**（$b=c$）では第 2 項は第 1 項に吸収され，準位 l が $(2l+1)^2$ 重に縮退する。第一励起準位は $E_{1,0}=\hbar^2/C$，温度換算で $\sim 10^5\,\mathrm{K}$ であり，単原子分子を質点とみなす根拠を与えている。]

分配関数と準古典近似（$b,\,c\ll kT$）は

$$\begin{aligned} z(T) &= \sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\mathrm{e}^{-bl(l+1)/kT}\sum_{m=-l}^{l}\mathrm{e}^{-(c-b)m^2/kT} \\ &\simeq \int_0^\infty(2l+1)e^{-bl(l+1)/kT}\mathrm{d}l\int_0^l 2\mathrm{e}^{-(c-b)m^2/kT}\mathrm{d}m \\ &= 2\int_0^\infty \mathrm{e}^{-(c-b)m^2/kT}\mathrm{d}m\int_m^\infty(2l+1)e^{-bl(l+1)/kT}\mathrm{d}l \\ &= \frac{2kT}{b}\int_0^\infty \mathrm{e}^{-(cm^2+bm)/kT}\mathrm{d}m \simeq \frac{kT}{b}\sqrt{\frac{\pi kT}{c}}=\frac{2IkT}{\hbar^2}\sqrt{\frac{2\pi CkT}{\hbar^2}} \end{aligned} \tag{18}$$

$c\ll kT$ だから，m のピーク（$m=-b/2c$）のずれ[3] による僅差は無視した。

以上が量子力学に立脚した準古典近似による等分配則であり，最初の**方便**で得られた結論は変わらない。分子内の電子は，骨組みの原子核と一体となって剛体のようにふるまっているわけではないが，剛体モデルは 古典統計における等分配側の破れの目安 を与えている。実際，電子状態の励起エネルギーは $\sim 10\,\mathrm{eV}$，温度にして $10^5\,\mathrm{K}$ 程度であり，通常温度の気体の熱運動で励起されることはない。

---

[2] 剛体のような質点系の合成角運動量も，個々の質点の角運動量と同じ交換関係を満たし，交換関係と昇降演算子 $L_\pm=L_x\pm iL_y$ を用いた**行列計算**で固有値を求めることができる。剛体の回転では**半整数**の固有値はない。

トルクの働かない剛体の自由回転（ハミルトニアンが回転の運動エネルギーだけ）では，空間固定系において角運動量ベクトル $\boldsymbol{L}$，したがってその大きさ $\boldsymbol{L}^2$ と方向，例えば L_z が保存される。これに対応する量子数が，l と m_l である。

回転対称な剛体では角速度ベクトル $\boldsymbol{\omega}$ の大きさと傾き $\boldsymbol{\omega}\cdot\boldsymbol{L}$（$=2\times$ 運動エネルギー）も一定であり，$\boldsymbol{L}$ の方向に z 軸をとれば，$L_z=\partial/i\partial\phi$ はベクトル $\boldsymbol{\omega}$（あるいは中心軸 ζ）の z 軸周りの回転（**正則歳差運動**）の演算子となり，物理的なイメージが明白である。さらに $L^2=B^2\omega^2+(C^2-B^2){\omega_\zeta}^2=\mathrm{constant}$ から，剛体に固定した慣性主軸系においては ω_ζ，したがって $L_\zeta=C\omega_\zeta$ が保存量であり（中心軸周りの**自転**；(16) で明らか），$L_\zeta=\partial/i\partial\psi$ に対応する量子数が m である。

以上のように剛体の自由度 3 に対応して，3 つの量子数 $(l,\,m_l,\,m)$ があると思えばよい。—— 空間固定系では慣性テンソルも運動により変化する物理量であるため，H と $\boldsymbol{L}^2$ および L_z の可換性を直接導くことは簡単ではないが（→ **詳細**），力学的な保存量だから $[H,\,L_z]=0$ であることは確かである。そうすると対称剛体では，$[\boldsymbol{L}^2,\,L_z]=0$ と (16) をあわせて $[L_z,\,L_\zeta]=0$ となり，($\boldsymbol{L}^2,\,L_z,\,L_\zeta$) は**共通な固有状態**をもつ。—— 水素原子中の電子の回転運動のように ∇^2 から派生した 1 粒子の角運動量では，この中心軸の周りの回転がないため自由度は 2 であり，m に対応する量子数はない。

[3] 扁平コマ（$B<C$）の場合に (17) の係数が $c-b<0$ となる可能性はあるが，積分近似で積分の順序を変えた表式から分かるように，分配関数の収束性は心配ない。また，主慣性モーメントに関する三角不等式

$$A+B\geq C\,,\ B+C\geq A\,,\ C+A\geq B\quad\rightarrow\quad A=B\ \ \text{のとき}\ \ 0\leq C\leq 2B$$

により，(18) のピークのずれの大きさは，$0\leq b/2c\leq 1$ であり，扁平（$B<C$）でも偏長（$B>C$）でも準古典近似では，ずれによる積分 (18) への影響は無視できる。

（詳細）角運動量演算子と交換関係 —— 剛体のオイラー角についての知識を必要とする。

空間固定系と慣性主軸系の両座標系の間の直交変換行列 $\mathbf{T}$ の成分は $(\theta,\, \phi,\, \psi)$ を含むため，それらについての微分を含む角運動量とは一般に可換でない。このため剛体系では，結果的に角運動量成分の交換関係の**符号が逆**になるが，固有値の行列計算に支障はない。また，両座標系の角運動量 $(L_x,\, L_y,\, L_z)$ と $(L_\xi,\, L_\eta,\, L_\zeta)$ の，どの成分の間も**可換**であることが示される。したがって 対称剛体に限らず，(15) から $[H,\, L_z] = 0$ である。

剛体の主軸 $(\xi,\, \eta,\, \zeta)$ 方向の単位ベクトルを（空間固定系で）以下のように書くとする：

$$\boldsymbol{a} = (T_{\xi x},\, T_{\xi y},\, T_{\xi z})\,,\ \boldsymbol{b} = (T_{\eta x},\, T_{\eta y},\, T_{\eta z})\,,\ \boldsymbol{c} = (T_{\zeta x},\, T_{\zeta y},\, T_{\zeta z}) \tag{19}$$

変換行列 $\mathbf{T}$ は左から作用するとし（→p.5 ※），例えば $\boldsymbol{L}$ の ξ 成分は以下のように表される：

$$L_\xi = \boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{L} = a_\alpha L_\alpha = T_{\xi\alpha} L_\alpha \quad (\alpha:\ x,\, y,\, z \text{ について和をとる}) \tag{20}$$

変換行列　冒頭の図の **Euler 角** 『 (1) z 軸の周りに ϕ，(2) 新しい y 軸（図の y' 軸）の周りに θ，(3) 最新の z 軸（同じく ζ 軸）の周りに ψ』の，３種の回転を 右から 順番に行列で表せばよい：

$$\mathbf{T} = \begin{pmatrix} \cos\psi & \sin\psi & 0 \\ -\sin\psi & \cos\psi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos\theta & 0 & -\sin\theta \\ 0 & 1 & 0 \\ \sin\theta & 0 & \cos\theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos\phi & \sin\phi & 0 \\ -\sin\phi & \cos\phi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{21}$$

$$= \begin{pmatrix} -\sin\phi\sin\psi + \cos\theta\cos\phi\cos\psi & \cos\phi\sin\psi + \cos\theta\sin\phi\cos\psi & -\sin\theta\cos\psi \\ -\sin\phi\cos\psi - \cos\theta\cos\phi\sin\psi & \cos\phi\cos\psi - \cos\theta\sin\phi\sin\psi & \sin\theta\sin\psi \\ \sin\theta\cos\phi & \sin\theta\sin\phi & \cos\theta \end{pmatrix} \tag{22}$$

逆変換は転置行列であるが，$\phi,\, \theta,\, \psi$ を順に逆回転 $-\psi,\, -\theta,\, -\phi$ に置き変えたものと考えてもよい。

角運動量演算子　ある軸の周りに回転したときに起きる座標変化でもたらされる，**波動関数**の変化を与える変位演算子である。先ず，z 軸の周りに $\delta\phi$ 回転するとき，$\theta,\, \psi$ は不変だから

$$\Psi(\theta,\, \phi + \delta\phi,\, \psi) = \mathrm{e}^{\delta\phi(\partial/\partial\phi)}\Psi(\theta,\, \phi,\, \psi) \simeq \left(1 + \delta\phi\frac{\partial}{\partial\phi}\right)\Psi(\theta,\, \phi,\, \psi) \tag{23}$$

この微小変位生成演算子[4] が（$\hbar$ を単位とする）角運動量の z 成分

$$iL_z = \frac{\partial}{\partial\phi} \tag{24}$$

である。以後はすべて微小変位とし，$\simeq$ は $=$ と書く。

次に x 軸の周りの回転については，$\delta\theta,\, \delta\phi,\, \delta\psi$ を x 軸周りの微小回転角 χ（以後，δ は省く）と関係づける必要がある。先ず ζ 軸上の点，$\boldsymbol{c} = (\sin\theta\cos\phi,\ \sin\theta\sin\phi,\ \cos\theta)$ の変位について

$$\delta x = \delta\theta\cos\theta\cos\phi - \delta\phi\sin\theta\sin\phi = 0 \tag{25}$$

$$\delta z = (\boldsymbol{\chi}\times\boldsymbol{c})_z = \chi y \ \rightarrow\ -\delta\theta\sin\theta = \chi\sin\theta\sin\phi \tag{26}$$

により，$\delta\theta,\, \delta\phi$ が χ で表される。$\delta\psi$ については ψ を含む拘束式が必要である。今度は ξ 軸上の点，$\boldsymbol{a} = (-\sin\phi\sin\psi + \cos\theta\cos\phi\cos\psi\,,\ \ldots\,,\ \ldots\,)$ の x 成分について

$$\begin{aligned} \delta x = & -\delta\theta\sin\theta\cos\phi\cos\psi - \delta\phi(\cos\phi\sin\psi + \cos\theta\sin\phi\cos\psi) \\ & - \delta\psi(\sin\phi\cos\psi + \cos\theta\cos\phi\sin\psi) = 0 \end{aligned} \tag{27}$$

[4] 並進変位の運動量演算子 $i\boldsymbol{p} = \hbar\nabla$，すなわち，$\Psi(\boldsymbol{r}+\boldsymbol{\epsilon}) - \Psi(\boldsymbol{r}) = \boldsymbol{\epsilon}\cdot\nabla\,\Psi(\boldsymbol{r}) = (i/\hbar)\,\boldsymbol{\epsilon}\cdot\boldsymbol{p}\,\Psi(\boldsymbol{r})$ に対応する。

と置くことにより，$\delta\psi$ を $\delta\theta, \delta\phi$ で表すことができる。以上から

$$\delta\theta = -\chi\sin\phi, \quad \delta\phi = -\chi\frac{\cos\theta\cos\phi}{\sin\theta}, \quad \delta\psi = \chi\,\frac{\cos\phi}{\sin\theta} \tag{28}$$

となり，x 軸の周りの微小回転 χ による変位に対して，線形な変位演算子 L_x を

$$\Psi(\theta+\delta\theta,\, \phi+\delta\phi,\, \psi+\delta\psi) - \Psi(\theta,\, \phi,\, \psi) = i\chi L_x\,\Psi(\theta,\, \phi,\, \psi) \tag{29}$$

と定義すれば

$$iL_x = -\sin\phi\frac{\partial}{\partial\theta} - \frac{\cos\phi}{\sin\theta}\left(\cos\theta\frac{\partial}{\partial\phi} - \frac{\partial}{\partial\psi}\right) \tag{30}$$

となる。同様にして

$$iL_y = \quad \cos\phi\frac{\partial}{\partial\theta} - \frac{\sin\phi}{\sin\theta}\left(\cos\theta\frac{\partial}{\partial\phi} - \frac{\partial}{\partial\psi}\right) \tag{31}$$

が得られる。慣性主軸系成分は変換行列 $\mathbf{T}$ を左からかけて得られるが，結果は ϕ, θ, ψ を $-\psi, -\theta, -\phi$ としてから，$-L_x \to L_\xi$，$-L_y \to L_\eta$，$-L_z \to L_\zeta$ としたものになる（例えば，$iL_\zeta = \partial/\partial\psi$）。あとはていねいに計算すれば

$$\boldsymbol{L}^2 = -\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta} - \frac{1}{\sin^2\theta}\left(\frac{\partial^2}{\partial\phi^2} - 2\cos\theta\frac{\partial^2}{\partial\phi\partial\psi} + \frac{\partial^2}{\partial\psi^2}\right) \tag{32}$$

と交換関係が求まる。$\boldsymbol{L}^2$ と L_z（および $\boldsymbol{L}^2$ と L_ζ）の可換性は (24) から自明に近い。

交換関係は，α, β, γ で x, y, z のいずれかを表すとして（**順不同**），テンソル記号

$$\mathcal{E}_{\alpha\beta\gamma} = \begin{cases} \ \ 1 & \text{if } \alpha\beta\gamma \text{ is cyclic } (xyz,\, yzx,\, zxy) \\ -1 & \text{if anti-cyclic } (zyx,\, yxz,\, xzy) \\ \ \ 0 & \text{otherwise } (zzx,\, xyx,\, yyy, \text{ etc.}) \end{cases} \tag{33}$$

を用いると，次のように表される（2 重添え字は和をとる）：

$$[\boldsymbol{L}^2,\, L_\alpha] = 0\ , \quad [L_\alpha,\, L_\beta] = i\mathcal{E}_{\alpha\beta\gamma}L_\gamma \tag{34}$$

$$[a_\alpha,\, L_\beta] = i\mathcal{E}_{\alpha\beta\gamma}a_\gamma\ , \quad [b_\alpha,\, L_\beta] = i\mathcal{E}_{\alpha\beta\gamma}b_\gamma\ , \quad [c_\alpha,\, L_\beta] = i\mathcal{E}_{\alpha\beta\gamma}c_\gamma \tag{35}$$

※　(20) の a_α と L_α は**可換**であり，変換行列が右から作用する形式にしてもかまわないことが分かる。

また，同じ記号を使って 2 つのベクトルのベクトル積を表すこともできる：

$$c_\gamma = (\boldsymbol{a}\times\boldsymbol{b})_\gamma = \mathcal{E}_{\gamma\alpha\beta}a_\alpha b_\beta \quad \text{etc.} \tag{36}$$

以上を用いれば，この節の冒頭で述べた剛体系での交換関係が得られる：

$$\begin{aligned} [L_\xi,\, L_\eta] &= [\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{L},\, \boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{L}] = [a_\alpha L_\alpha,\, b_\beta L_\beta] \\ &= a_\alpha b_\beta\,[L_\alpha,\, L_\beta] + a_\alpha\,[L_\alpha,\, b_\beta]\,L_\beta + b_\beta\,[a_\alpha,\, L_\beta]\,L_\alpha \\ &= i\mathcal{E}_{\alpha\beta\gamma}a_\alpha b_\beta L_\gamma - i\mathcal{E}_{\beta\alpha\gamma}a_\alpha b_\gamma L_\beta + i\mathcal{E}_{\alpha\beta\gamma}a_\gamma b_\beta L_\alpha \\ &= -ic_\alpha L_\alpha = -iL_\zeta \qquad \text{etc.} \qquad \textbf{（符号に注意）} \end{aligned} \tag{37}$$

$$\begin{aligned} [L_\xi,\, L_\alpha] &= [\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{L},\, L_\alpha] = [a_\beta L_\beta,\, L_\alpha] \\ &= a_\beta[L_\beta,\, L_\alpha] + [a_\beta,\, L_\alpha]L_\beta \\ &= i\mathcal{E}_{\beta\alpha\gamma}a_\beta L_\gamma + i\mathcal{E}_{\beta\alpha\gamma}a_\gamma L_\beta = i(\mathcal{E}_{\gamma\alpha\beta} + \mathcal{E}_{\beta\alpha\gamma})\,a_\gamma L_\beta = 0 \qquad \text{etc.} \end{aligned} \tag{38}$$