

5 角運動量とスピン

5.1 目標

中心力ポテンシャルの計算で分かったこと

- 角度方向の解は球面調和関数 $Y_\ell^m(\theta, \phi)$
- $\hat{L}^2$ の固有値: $\ell(\ell+1)\hbar^2$
- $\hat{L}_z$ の固有値: $m\hbar$
- ℓ は非負整数で $m = 0, \pm 1, \dots, \pm \ell$

角運動量演算子の交換関係のみで導出すると、 ℓ に対応する量が整数だけでなく半整数 ($1/2, 3/2, \dots$) でも許されることを示す。

スピン量子数の概念を導入し、物理系への応用を示す。

5.2 角運動量演算子の交換関係

角運動量演算子:

$$\hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}} = \begin{pmatrix} \hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y \\ \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z \\ \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x \end{pmatrix} \quad (170)$$

空間 3 次元の座標と運動量の交換関係は $(x, y, z) = (1, 2, 3)$ として

$$[\hat{r}_a, \hat{p}_b] = i\hbar\delta_{ab}, \quad [\hat{r}_a, \hat{r}_b] = [\hat{p}_a, \hat{p}_b] = 0 \quad (a, b = 1, 2, 3) \quad (171)$$

つまり $[\hat{x}, \hat{p}_x] = [\hat{y}, \hat{p}_y] = [\hat{z}, \hat{p}_z] = i\hbar$ でそれ以外 ($[\hat{x}, \hat{p}_y]$ 、 $[\hat{x}, \hat{y}]$ など) は 0。

角運動量演算子の交換関係

$$\begin{aligned} [\hat{L}_x, \hat{L}_y] &= [\hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y, \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z] \\ &= [\hat{y}\hat{p}_z, \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z] - [\hat{z}\hat{p}_y, \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z] \\ &= [\hat{y}\hat{p}_z, \hat{z}\hat{p}_x] + [\hat{z}\hat{p}_y, \hat{x}\hat{p}_z] \\ &= \hat{y}[\hat{p}_z, \hat{z}]\hat{p}_x + \hat{x}[\hat{z}, \hat{p}_z]\hat{p}_y \\ &= \hat{y}(-i\hbar)\hat{p}_x + \hat{x}i\hbar\hat{p}_y \\ &= i\hbar(\hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x) \\ &= i\hbar\hat{L}_z \\ [\hat{L}_y, \hat{L}_z] &= i\hbar\hat{L}_x \\ [\hat{L}_z, \hat{L}_x] &= i\hbar\hat{L}_y \end{aligned}$$

完全反対称テンソル ϵ_{ab} を用いると、これらはまとめて

$$[\hat{L}_a, \hat{L}_b] = i\hbar\epsilon_{abc}\hat{L}_c \quad (172)$$

と表される（繰り返し添字については和をとる、HP の補足参照）。

$\hat{\mathbf{L}}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2$ と $\hat{L}_z$ は交換する

$$\begin{aligned} [\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{L}_z] &= [\hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2, \hat{L}_z] \\ &= [\hat{L}_x^2, \hat{L}_z] + [\hat{L}_y^2, \hat{L}_z] \\ &= \hat{L}_x[\hat{L}_x, \hat{L}_z] + [\hat{L}_x, \hat{L}_z]\hat{L}_x + \hat{L}_y[\hat{L}_y, \hat{L}_z] + [\hat{L}_y, \hat{L}_z]\hat{L}_y \\ &= \hat{L}_x(-i\hbar\hat{L}_y) + (-i\hbar\hat{L}_y)\hat{L}_x + \hat{L}_y(i\hbar\hat{L}_x) + (i\hbar\hat{L}_x)\hat{L}_y \\ &= 0 \end{aligned} \quad (173)$$

$$[\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{L}_x] = 0 \quad (174)$$

$$[\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{L}_y] = 0 \quad (175)$$

交換する演算子の組は同時対角化可能で、**同時固有状態**が存在する（HP の第 5 回補足参照）。

例) $[\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{L}_z] = 0 \Rightarrow Y_\ell^m$ が固有値 $\ell(\ell+1)\hbar^2$ と $m\hbar$ を持つ

例) 中心力の場合に $[\hat{H}, \hat{\mathbf{L}}^2] = 0 \Rightarrow \psi_\ell$ が固有値 E と $\ell(\ell+1)\hbar^2$ を持つ。

$[\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{L}_x] = 0$ なので $\hat{\mathbf{L}}^2$ と $\hat{L}_x$ の同時固有状態も存在するが、 $[\hat{L}_x, \hat{L}_z] \neq 0$ なので $\hat{\mathbf{L}}^2$ と $\hat{L}_z$ と $\hat{L}_x$ の同時固有状態はない。

角運動量の大きさと 1 つの方向成分を決定（観測）すると、他の方向成分は不確定になる。

角運動量演算子はエルミート：

$$\hat{L}_x^\dagger = (\hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y)^\dagger = \hat{p}_z^\dagger\hat{y}^\dagger - \hat{p}_y^\dagger\hat{z}^\dagger = \hat{p}_z\hat{y} - \hat{p}_y\hat{z} = \hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y = \hat{L}_x$$

5.3 生成消滅（昇降）演算子

無次元の角運動量演算子 $\hat{j}$ を定義（ $\mathbf{L}$ の次元は xp と同じで $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$ より $\hbar$ と同じ）

$$\hat{j} = \frac{\hat{\mathbf{L}}}{\hbar} \quad (176)$$

交換関係は、式 (172) より（ $\hbar$ がなくなる）

$$[\hat{j}_a, \hat{j}_b] = i\epsilon_{abc}\hat{j}_c \quad (177)$$

生成演算子（上昇演算子とも呼ばれる）

$$\hat{j}_+ = \hat{j}_x + i\hat{j}_y \quad (178)$$

消滅演算子（下降演算子とも呼ばれる）

$$\hat{j}_- = \hat{j}_x - i\hat{j}_y \quad (179)$$

これらは $\hat{j}_\pm = \hat{j}_\mp^\dagger$ の関係にある。生成消滅演算子同士の交換関係 ($[\hat{j}_-, \hat{j}_-] = [\hat{j}_+, \hat{j}_+] = 0$)

$$[\hat{j}_+, \hat{j}_-] = [\hat{j}_x + i\hat{j}_y, \hat{j}_x - i\hat{j}_y] = -i[\hat{j}_x, \hat{j}_y] + i[\hat{j}_y, \hat{j}_x] = -ii\hat{j}_z + i(-i\hat{j}_z) = 2\hat{j}_z \quad (180)$$

生成消滅演算子と $\hat{j}_z$ 、 $\hat{j}^2$ との交換関係

$$\begin{aligned} [\hat{j}_z, \hat{j}_-] &= [\hat{j}_z, \hat{j}_x - i\hat{j}_y] = [\hat{j}_z, \hat{j}_x] - i[\hat{j}_z, \hat{j}_y] = i\hat{j}_y - i(-i\hat{j}_x) = -(\hat{j}_x - i\hat{j}_y) \\ &= -\hat{j}_- \quad ([\hat{n}, \hat{a}] = -\hat{a} \text{ と似ている}) \end{aligned} \quad (181)$$

$$[\hat{j}_z, \hat{j}_+] = \hat{j}_+ \quad ([\hat{n}, \hat{a}^\dagger] = \hat{a}^\dagger \text{ と似ている}) \quad (182)$$

$$[\hat{j}^2, \hat{j}_-] = [\hat{j}^2, \hat{j}_x - i\hat{j}_y] = [\hat{j}^2, \hat{j}_x] - i[\hat{j}^2, \hat{j}_y] = 0 \quad (183)$$

$$[\hat{j}^2, \hat{j}_+] = 0 \quad (184)$$

$\hat{j}^2$ の表記（後で使うための変形）：

$$\hat{j}^2 = \hat{j}_x^2 + \hat{j}_y^2 + \hat{j}_z^2 \quad (185)$$

ここで

$$\begin{aligned} \hat{j}_+\hat{j}_- &= (\hat{j}_x + i\hat{j}_y)(\hat{j}_x - i\hat{j}_y) \\ &= \hat{j}_x^2 + i\hat{j}_y\hat{j}_x - i\hat{j}_x\hat{j}_y + \hat{j}_y^2 \\ &= \hat{j}_x^2 + \hat{j}_y^2 - i[\hat{j}_x, \hat{j}_y] \\ &= \hat{j}_x^2 + \hat{j}_y^2 + \hat{j}_z \\ \hat{j}_x^2 + \hat{j}_y^2 &= \hat{j}_+\hat{j}_- - \hat{j}_z \end{aligned}$$

なので

$$\hat{j}^2 = \hat{j}_+\hat{j}_- - \hat{j}_z + \hat{j}_z^2 \quad (186)$$

また式 (180) より $\hat{j}_+\hat{j}_- = \hat{j}_-\hat{j}_+ + 2\hat{j}_z$ なので

$$\hat{j}^2 = \hat{j}_-\hat{j}_+ + 2\hat{j}_z - \hat{j}_z + \hat{j}_z^2 = \hat{j}_-\hat{j}_+ + \hat{j}_z + \hat{j}_z^2 \quad (187)$$

5.4 固有状態

$\hat{j}^2$ と $\hat{j}_z$ は交換するので同時固有状態を持つ。それぞれの固有値を λ 、 m として、規格化された固有状態を $|\lambda, m\rangle$ と表記（まだ m は整数とは分かっていることに注意）：

$$\hat{j}^2 |\lambda, m\rangle = \lambda |\lambda, m\rangle \quad (188)$$

$$\hat{j}_z |\lambda, m\rangle = m |\lambda, m\rangle \quad (189)$$

$$\langle \lambda, m | \lambda, m \rangle = 1 \quad (190)$$

$\hat{j}_\pm$ を作用させたときの λ の変化：式 (184)、式 (183) より

$$\hat{j}^2(\hat{j}_\pm |\lambda, m\rangle) = \hat{j}_\pm \hat{j}^2 |\lambda, m\rangle = \hat{j}_\pm \lambda |\lambda, m\rangle = \lambda(\hat{j}_\pm |\lambda, m\rangle)$$

つまり $\hat{j}_\pm$ を作用させても固有値 λ は変化しない。

$\hat{j}_\pm$ を作用させたときの m の変化：式 (181) と (182) をまとめると

$$\begin{aligned} [\hat{j}_z, \hat{j}_\pm] &= \pm \hat{j}_\pm \\ \hat{j}_z \hat{j}_\pm - \hat{j}_\pm \hat{j}_z &= \pm \hat{j}_\pm \\ \hat{j}_z \hat{j}_\pm &= \hat{j}_\pm \hat{j}_z \pm \hat{j}_\pm \\ \hat{j}_z(\hat{j}_\pm |\lambda, m\rangle) &= (\hat{j}_\pm \hat{j}_z \pm \hat{j}_\pm) |\lambda, m\rangle \\ &= \hat{j}_\pm (\hat{j}_z \pm 1) |\lambda, m\rangle \\ &= \hat{j}_\pm (m \pm 1) |\lambda, m\rangle \\ &= (m \pm 1)(\hat{j}_\pm |\lambda, m\rangle) \end{aligned}$$

つまり $\hat{j}_+$ ($\hat{j}_-$) を作用させるとは固有値 m が 1 大きい (1 小さい) 状態になる。

式 (185) ($\hat{j}^2 = \hat{j}_x^2 + \hat{j}_y^2 + \hat{j}_z^2$) を状態 $|\lambda, m\rangle$ で挟むと

$$\langle \lambda, m | \hat{j}^2 | \lambda, m \rangle = \langle \lambda, m | \hat{j}_x^2 | \lambda, m \rangle + \langle \lambda, m | \hat{j}_y^2 | \lambda, m \rangle + \langle \lambda, m | \hat{j}_z^2 | \lambda, m \rangle \quad (191)$$

左辺は、 $|\lambda, m\rangle$ は規格化してあることから

$$\langle \lambda, m | \hat{j}^2 | \lambda, m \rangle = \langle \lambda, m | \lambda | \lambda, m \rangle = \lambda \langle \lambda, m | \lambda, m \rangle = \lambda$$

一方右辺第 3 項は

$$\langle \lambda, m | \hat{j}_z^2 | \lambda, m \rangle = \langle \lambda, m | \hat{j}_z m | \lambda, m \rangle = \langle \lambda, m | m^2 | \lambda, m \rangle = m^2$$

であり、 $\hat{j}_x$ 、 $\hat{j}_y$ はエルミートなので

$$\begin{aligned} \langle \lambda, m | \hat{j}_x^2 | \lambda, m \rangle &= \langle \lambda, m | \hat{j}_x^\dagger \hat{j}_x | \lambda, m \rangle = \|\hat{j}_x |\lambda, m\rangle\|^2 \geq 0 \\ \langle \lambda, m | \hat{j}_y^2 | \lambda, m \rangle &\geq 0 \end{aligned}$$

よって式 (191) より

$$\lambda = \underbrace{\langle \lambda, m | \hat{j}_x^2 | \lambda, m \rangle + \langle \lambda, m | \hat{j}_y^2 | \lambda, m \rangle}_{\geq 0} + m^2 \quad (192)$$

$$\lambda \geq m^2 \geq 0 \quad (\hat{j}_z \text{ がエルミートなので } m \text{ は実数}) \quad (193)$$

となるが、この意味は

- λ は非負

- $\sqrt{\lambda} \geq |m|$ 、つまり $-\sqrt{\lambda} \leq m \leq \sqrt{\lambda}$ となり m に上限と下限がある。

実際の m の上限は必ずしも $\sqrt{\lambda}$ とは限らない (m を決めたときの $\hat{j}_x^2$ などの期待値がわからないので)。 m の**最大値を $j \geq 0$ と定義**すると、状態 $|\lambda, j\rangle$ ($\hat{j}_z$ の固有値 m が最大値 j である状態) に $\hat{j}_+$ を作用させても $m = j + 1$ の状態はないので

$$\hat{j}_+ |\lambda, j\rangle = 0 \quad (194)$$

となる。ここで式 (187) の $\hat{j}^2$ の表式を $|\lambda, j\rangle$ に作用させると

$$\begin{aligned} \hat{j}^2 |\lambda, j\rangle &= (\hat{j}_- \hat{j}_+ + \hat{j}_z + \hat{j}_z^2) |\lambda, j\rangle \\ \lambda |\lambda, j\rangle &= (j + j^2) |\lambda, j\rangle \end{aligned}$$

つまり

$$\lambda = j(j + 1) = j^2 + j \quad (195)$$

一方 $|\lambda, j\rangle$ に消滅演算子 $\hat{j}_-$ を作用させることで $m = j - 1, j - 2, \dots$ の状態が作られるが m には下限が存在するので、 n 回作用させた時に

$$\begin{aligned} (\hat{j}_-)^n |\lambda, j\rangle &\propto |\lambda, j - n\rangle \\ (\hat{j}_-)^{n+1} |\lambda, j\rangle &\propto \hat{j}_- |\lambda, j - n\rangle = 0 \end{aligned}$$

となる n が存在する。式 (186) の $\hat{j}^2$ の表式を $|\lambda, j - n\rangle$ に作用させると

$$\begin{aligned} \hat{j}^2 |\lambda, j - n\rangle &= (\hat{j}_+ \hat{j}_- - \hat{j}_z + \hat{j}_z^2) |\lambda, j - n\rangle \\ \lambda |\lambda, j - n\rangle &= [-(j - n) + (j - n)^2] |\lambda, j - n\rangle \\ \lambda &= -j + n + j^2 - 2nj + n^2 = n^2 + n(1 - 2j) + j^2 - j \end{aligned}$$

以上より

$$\begin{aligned} j^2 + j &= n^2 + n(1 - 2j) + j^2 - j \\ 0 &= n^2 + n(1 - 2j) - 2j \\ 0 &= (n - 2j)(n + 1) \end{aligned}$$

この解は $n = 2j$ または $n = -1$ であるが、 n は演算回数なので非負整数であることから、

$$j = \frac{n}{2} \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

を得る。このとき m の最小値は $j - n = j - 2j = -j$ となる。以上まとめると、

$$\lambda = j(j + 1) \quad (196)$$

$$m = j, j - 1, \dots, -j + 1, -j \quad (197)$$

ただし j は非負整数 ($0, 1, 2, \dots$ 、角運動量に対応) **または正の半整数** ($1/2, 3/2, 5/2, \dots$)。