Note.(2)

文責: 吉野 惇郎

2003-03-07

3.5 角運動量の固有値と固有状態

交換関係とはしご演算子

$$\mathbf{J}^2 \equiv J_x^2 + J_y^2 + J_z^2 \tag{3.5.1}$$

で定義される $\mathbf{J}^2$ は J_k と交換する:

$$[\mathbf{J}^2, J_k] = 0 \tag{3.5.2}$$

$\mathbf{J}^2$ と J_z が交換するとすると、これらの同時固有ケット $|a,b\rangle$ があって次式が成り立つ。

$$\mathbf{J}^2|a,b\rangle = a|a,b\rangle \tag{3.5.4}$$

$$J_z|a,b\rangle = b|a,b\rangle$$

ここで、はしご演算子

$$J_\pm \equiv J_x \pm iJ_y \tag{3.5.5}$$

を定義すると、$J_\pm$ は $|a,b\rangle$ に次のように作用する:

$$J_\pm|a,b\rangle = c_\pm|a,b\pm\hbar\rangle \tag{3.5.12}$$

$c_\pm$ については行列要素を求めるときに求める。

note: $[J_x, J_y] = i\hbar J_z, [J_z, J_\pm] = \pm\hbar J_\pm, J_z J_\pm|a,b\rangle = (b+\hbar)J_\pm|a,b\rangle$

$\mathbf{J}^2$ および J_z の固有値

$$a \geq b^2 \tag{3.5.13}$$

であることが、$\mathbf{J}^2 - J_z^2$ の期待値を考えることでわかる。

note: $J_+J_- + J_-J_+ = 2(J_x^2 + J_y^2), J_- = J_+^\dagger,$ ノルム ≥ 0

これより、b には上下限が存在することがわかるので、次式を満たす必要がある。

$$J_+|a,b_{max}\rangle = 0 \tag{3.5.17}$$

$$J_-|a,b_{min}\rangle = 0 \tag{3.5.23}$$

ここで、

$$J_-J_+|a,b_{max}\rangle = (a - b_{max}^2 - \hbar b_{max})|a,b_{max}\rangle = 0$$

$$J_+J_-|a,b_{mix}\rangle = (a - b_{min}^2 + \hbar b_{mix})|a,b_{mix}\rangle = 0$$

であるから、

$$a = b_{max}(b_{max} + \hbar) = (-b_{min})((-b_{mix}) + \hbar)$$

よって、

$$b_{max} = -b_{min} \tag{3.5.26}$$

と得られる。

note: $J_+J_- = \mathbf{J}^2 - J_z^2 + \hbar J_z$

これより、$|a,-b_{max}\rangle$ に J_+ を n 回作用させると $|a,b_{max}\rangle$ になるとするとき、

$$b_{max} = \frac{n\hbar}{2} \tag{3.5.29}$$

である。ここで、

$$j \equiv \frac{b_{max}}{\hbar} \tag{3.5.30}$$

$$b \equiv m\hbar \tag{3.5.32}$$

と定義すると、

$$j = \frac{n}{2} \tag{3.5.30}$$

$$a = \hbar^2 j(j+1) \tag{3.5.31}$$

$$m = -j, -j+1, ..., j-1, j \tag{3.5.33}$$

となる。ゆえに、$\mathbf{J}^2$ と J_z の同時固有ケットを $|j,m\rangle$ であらわすとき固有値方程式は

$$\mathbf{J}^2|j,m\rangle = j(j+1)\hbar^2|j,m\rangle \tag{3.5.34}$$

$$J_z|j,m\rangle = m\hbar|j,m\rangle$$

となる。

角運動量演算子の行列要素

$$\langle j', m'|\mathbf{J}^2|j, m\rangle = j(j+1)\hbar^2\delta_{j'j}\delta_{m'm} \tag{3.5.35}$$

$$\langle j', m'|J_z|j, m\rangle = m\hbar\delta_{j'j}\delta_{m'm}$$

$$\langle j', m'|J_\pm|j, m\rangle = \sqrt{j(j+1) - m(m\pm 1)}\hbar\delta_{j'j}\delta_{m'm\pm 1} \tag{3.5.41}$$

note: $J_\pm|j, m\rangle = c_\pm|j, m\pm 1\rangle, J_\mp J_\pm = \mathbf{J}^2 - J_z^2 \mp \hbar J_z$, ノルム $= |c_\pm|^2 = \{j(j+1) - m(m\pm 1)\}\hbar^2$

回転演算子の表現　回転演算子 $\mathcal{D}(R)$ の行列要素は、回転 R が $\mathbf{n}$ と ϕ で指定されるとき、

$$\mathcal{D}^{(j)}_{m'm}(R) = \langle j, m'|\exp(\frac{-i\mathbf{J}\cdot\mathbf{n}\phi}{\hbar})|j, m\rangle \tag{3.5.42}$$

3.6　軌道角運動量

軌道角運動量 $\mathbf{L}$ を

$$\mathbf{L} \equiv \mathbf{x} \times \mathbf{p} \tag{3.6.1}$$

と定義する。一粒子について内部自由度を無視できる場合は $\mathbf{L}$ は $\mathbf{J}$ に一致することを以下で示す。

回転の生成演算子としての軌道角運動量　$\mathbf{L}$ は、

- 角運動量の交換関係 $[L_x, L_y] = i\hbar L_z$
- 回転の生成 $(\mathbf{1} - iL_z\delta\phi/\hbar)|x', y', z'\rangle = |x' - y'\delta\phi, y' + x'\delta\phi, z'\rangle$

を満足する。

note: $[x_i, x_j] = 0, [p_i, p_j] = 0, [x_i, p_j] = i\hbar\delta_{ij}, L_z = xp_y - yp_x, \mathcal{T}(d\mathbf{x}') = \mathbf{1} - i\mathbf{p}d\mathbf{x}'/\hbar$

$\langle x', y', z'|\alpha\rangle$ で与えられる波動関数を持つ一粒子を z 軸まわりで無限小回転させることを考える。

$$\begin{aligned}\langle x', y', z'|\alpha\rangle \to \langle x', y', z'|(\mathbf{1} - \frac{iL_z\delta\phi}{\hbar})|\alpha\rangle &= \langle x' + y'\delta\phi, y' - x'\delta\phi, z'|\alpha\rangle \\ &= \langle r, \theta, \phi - \delta\phi|\alpha\rangle \\ &= \langle r, \theta, \phi|\alpha\rangle - \delta\phi\frac{\partial}{\partial\phi}\langle r, \theta, \phi|\alpha\rangle\end{aligned}$$

より、

$$\langle \mathbf{x}'|L_z|\alpha\rangle = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\phi}\langle \mathbf{x}'|\alpha\rangle \tag{3.6.9}$$

が得られる。

$L_x, L_y, L_\pm$ についても同様の検討を行うことにより、

$$\langle \mathbf{x}'|\mathbf{L}^2|\alpha\rangle = -\hbar^2\Lambda^2\langle \mathbf{x}'|\alpha\rangle$$

とかける。

note:

$$\mathbf{L}^2 = L_z^2 + \frac{1}{2}(L_+L_- - L_-L_+)$$

$$\Lambda^2\psi = \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2\psi}{\partial\phi^2} + \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\frac{\partial\psi}{\partial\theta})$$

$$\nabla^2\psi = \frac{1}{r}\frac{\partial^2(r\psi)}{\partial r^2} + \frac{1}{r^2}\Lambda^2\psi$$

球面調和関数　球対称のポテンシャルのもとでスピンを持たない一個の粒子を考える。エネルギー固有関数は

$$\langle \mathbf{x}'|n, l, m\rangle = R_{nl}(r)Y_l^m(\theta, \phi) \tag{3.6.22}$$

note: H が球対称なとき H は $L_z, \mathbf{L}^2$ と交換。エネルギー固有ケットも軌道角運動量の固有ケット。

角度依存性について考える。方向固有ケット $|\mathbf{n}\rangle$ を定義し、角度依存部分を分離した次の球面調和関数を考える。

$$\langle \mathbf{n}|l, m\rangle = Y_l^m(\theta, \phi) = Y_l^m(\mathbf{n}) \tag{3.6.23}$$

軌道角運動量の固有ケット $|l, m\rangle$ を含む関係式から対応する球面調和関数を含む関係式が得られる。

例 1:

$$L_z|l, m\rangle = m\hbar|l, m\rangle \tag{3.6.24}$$

からは

$$-i\hbar\frac{\partial}{\partial\phi}Y_l^m(\theta, \phi) = m\hbar Y_l^m(\theta, \phi) \tag{3.6.26}$$

が得られる。$Y_l^m(\theta, \phi)$ の ϕ 依存部分は $e^{im\phi}$ の形になることがわかる。

例 2:

$$\mathbf{L}^2|l, m\rangle = l(l+1)\hbar^2|l, m\rangle \tag{3.6.27}$$

からは

$$\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2} + \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta} + l(l+1))Y_l^m = 0 \tag{3.6.28}$$

が得られる。

note: まず左から $\langle \mathbf{n}|$ をかける。

例 3:

$$\langle l', m'|l, m\rangle = \delta_{ll'}\delta_{mm'} \tag{3.6.29}$$

からは

$$\int_0^{2\pi} d\phi \int_{-1}^{1} d(\cos\theta) Y_{l'}^{m'*}(\theta,\phi) Y_l^m(\theta,\phi) = \delta_{ll'}\delta_{mm'} \tag{3.6.30}$$

が得られる。

note: まず真ん中に $\int d\Omega_{\mathbf{n}}|\mathbf{n}\rangle\langle\mathbf{n}| = 1$ を挿入する。

$$Y_l^m(\theta,\phi) = \frac{(-1)^l}{2^l l!}\sqrt{\frac{(2l+1)(l+m)!}{4\pi(l-m)!}} e^{im\phi} \frac{1}{\sin^m\theta} \frac{d^{(l-m)}}{d(\cos\theta)^{(l-m)}} (\sin\theta)^{2l} \quad (m \geq 0) \tag{3.6.37}$$

$$Y_l^{-m}(\theta,\phi) = (-1)^m (Y_l^m(\theta,\phi))^* \tag{3.6.38}$$

回転行列としての球面調和関数

3.7 角運動量の合成

角運動量の合成の簡単な例　スピンを持つ粒子について考える。例 1: 一個のスピン 1/2 粒子の基底ケットは、位置固有ケット $\{|\mathbf{x}'\rangle\}$ で張られる空間と $\{|+\rangle, |-\rangle\}$ で張られるスピン空間との直積空間のケット $|\mathbf{x}', \pm\rangle = |\mathbf{x}'\rangle \otimes |\pm\rangle$ である。

回転の生成演算子 $\mathbf{J}$ は、

$$\mathbf{J} = \mathbf{L} \otimes \mathbf{1} + \mathbf{1} \otimes \mathbf{S} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$$

スピンを持つ一粒子の状態ケットは、$\mathbf{L}^2, \mathbf{S}^2, L_z, S_z$ の同時固有ケットで展開することも、$\mathbf{J}^2, J_z, \mathbf{L}^2, \mathbf{S}^2$ の同時固有ケットで展開することもできる。

例 2: 2 個のスピン 1/2 粒子のスピンだけ考える。全体のスピン演算子は

$$\mathbf{S} = \mathbf{S}_1 \otimes \mathbf{1} + \mathbf{1} \otimes \mathbf{S}_2 = \mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2$$

この系の状態ケットは、$\mathbf{S}^2, S_z$ の同時固有ケット $|s, m\rangle$ で展開することも、S_{1z}, S_{2z} の同時固有ケット $|m_1, m_2\rangle$ で展開することもできる。この二通りの方法の基底ケットの間の関係は以下の通りである。

$$|1,+1\rangle = |+,+\rangle \tag{3.7.15}$$

$$|1,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+,-\rangle + |-,+\rangle)$$

$$|1,-1\rangle = |-,-\rangle$$

$$|0,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+,-\rangle - |-,+\rangle)$$

これらの式の右辺の係数はクレプシュ· ゴルダン係数のもっとも簡単な例である。

角運動量合成の形式論　異なる部分空間にある二つの角運動量演算子 $\mathbf{J}_1, \mathbf{J}_2$ から全角運動量 $\mathbf{J}$ を

$$\mathbf{J} \equiv \mathbf{J}_1 \otimes \mathbf{1} + \mathbf{1} \otimes \mathbf{J}_2 = \mathbf{J}_1 + \mathbf{J}_2$$

で定義する。

基底ケットの選び方として次の二通りがある:

(A) $\mathbf{J}_1^2, \mathbf{J}_2^2, J_{1z}, J_{2z}$ の同時固有ケット $|j_1 j_2; m_1 m_2\rangle$

(B) $\mathbf{J}^2, J_z, \mathbf{J}_1^2, \mathbf{J}_2^2$ の同時固有ケット $|j_1 j_2; jm\rangle$

ここで、基底変換

$$|j_1 j_2; jm\rangle = \sum_{m_1} \sum_{m_2} |j_1 j_2; m_1 m_2\rangle \langle j_1 j_2; m_1 m_2 | j_1 j_2; jm\rangle \tag{3.7.33}$$

が成り立つ。ここで現れた変換行列の要素 $\langle j_1 j_2; m_1 m_2 | j_1 j_2; jm\rangle$ はクレプシュ · ゴルダン係数である。

クレプシュ· ゴルダン係数の性質:

- $m = m_1 + m_2$ でないと 0
- $|j_1 - J_2| \leq j \leq j_1 + j_2$ でないと 0
- クレプシュ· ゴルダン係数はユニタリ行列をつくる。その行列要素は実にとることができ、このときは直交行列となる。
- 規格化条件 $\sum_{m_1} \sum_{m_2} |\langle j_1 j_2; m_1 m_2 | j_1 j_2; jm\rangle|^2 = 1$

note: $(J_z - J_{1z} - J_{2z})|jm\rangle = 0$

クレプシュ· ゴルダン係数に対する漸化式

$$\begin{aligned} \langle j_1 j_2; m_1 m_2 | J_\pm/\hbar | j_1 j_2; jm\rangle &= \\ \sqrt{j(j+1) - m(m \pm 1)} \langle m_1, m_2 | j, m \pm 1\rangle &= \\ \sqrt{j_1(j_1+1) - (m_1 \mp 1) m_1} \langle m_1 \mp 1, m_2 | j, m\rangle &+ \sqrt{j_2(j_2+1) - (m_2 \mp 1) m_2} \langle m_1, m_2 \mp 1 | j, m\rangle \end{aligned}$$

note: 式 (3.7.33) から。$m_1 + m_2 = m \pm 1$ のとき 0 にならない。

クレプシュ· ゴルダン係数と回転行列