# 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 $Y_\ell^m(\theta,\phi)$
- $\hat{\boldsymbol{L}}^2$ の固有値：$\ell(\ell+1)\hbar^2$
- $\hat{L}_z$ の固有値：$m\hbar$
- $\ell$ は非負整数で $m=0,\pm1,\cdots,\pm\ell$

角運動量演算子の**交換関係のみで導出**すると、$\ell$ に対応する量が**整数だけでなく半整数** $(1/2,3/2,\cdots)$ 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：

$$\hat{\boldsymbol{L}}=\hat{\boldsymbol{r}}\times\hat{\boldsymbol{p}}=\begin{pmatrix}\hat{y}\hat{p}_z-\hat{z}\hat{p}_y\\ \hat{z}\hat{p}_x-\hat{x}\hat{p}_z\\ \hat{x}\hat{p}_y-\hat{y}\hat{p}_x\end{pmatrix}\tag{175}$$

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

$$[\hat{r}_i,\hat{p}_j]=i\hbar\delta_{ij},\quad[\hat{r}_i,\hat{r}_j]=[\hat{p}_i,\hat{p}_j]=0\quad(i,j=1,2,3)\tag{176}$$

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 $\epsilon_{ijk}$ を用いると、これらはまとめて

$$[\hat{L}_i, \hat{L}_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}\hat{L}_k \tag{177}$$

と表される（繰り返し添字については和をとる、補足参照）。
$\hat{\boldsymbol{L}}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2$ と $\hat{L}_z$ は交換する

$$\begin{aligned}[\hat{\boldsymbol{L}}^2, \hat{L}_z] &= [\hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2, \hat{L}_z] \\ &= [\hat{L}_x^2, \hat{L}_z] + [\hat{L}_y^2, \hat{L}_z] \\ &= \hat{L}_x[\hat{L}_x, \hat{L}_z] + [\hat{L}_x, \hat{L}_z]\hat{L}_x + \hat{L}_y[\hat{L}_y, \hat{L}_z] + [\hat{L}_y, \hat{L}_z]\hat{L}_y \\ &= \hat{L}_x(-i\hbar\hat{L}_y) + (-i\hbar\hat{L}_y)\hat{L}_x + \hat{L}_y(i\hbar\hat{L}_x) + (i\hbar\hat{L}_x)\hat{L}_y \\ &= 0 \end{aligned} \tag{178}$$

$$[\hat{\boldsymbol{L}}^2, \hat{L}_x] = 0 \tag{179}$$

$$[\hat{\boldsymbol{L}}^2, \hat{L}_y] = 0 \tag{180}$$

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（第 5 回補足参照）。
例）$[\hat{\boldsymbol{L}}^2, \hat{L}_z] = 0 \Rightarrow Y_\ell^m$ が固有値 $\ell(\ell+1)\hbar^2$ と $m\hbar$ を持つ
例）中心力の場合に $[\hat{H}, \hat{\boldsymbol{L}}^2] = 0 \Rightarrow \psi_\ell$ が固有値 $E$ と $\ell(\ell+1)\hbar^2$ を持つ。

$[\hat{\boldsymbol{L}}^2, \hat{L}_x] = 0$ なので $\hat{\boldsymbol{L}}^2$ 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 $\hat{\boldsymbol{L}}^2$ 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 $\boldsymbol{j}$ を定義（$\boldsymbol{L}$ の次元は $xp$ と同じで $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$ より $\hbar$ と同じ）

$$\hat{\boldsymbol{j}} = \frac{\hat{\boldsymbol{L}}}{\hbar} \tag{181}$$

交換関係は、式 (177) より（$\hbar$ がなくなる）

$$[\hat{j}_i, \hat{j}_j] = i\epsilon_{ijk}\hat{j}_k \tag{182}$$

**生成演算子**（上昇演算子とも呼ばれる）

$$\hat{j}_+ = \hat{j}_x + i\hat{j}_y \tag{183}$$

**消滅演算子**（下降演算子とも呼ばれる）

$$\hat{j}_- = \hat{j}_x - i\hat{j}_y \tag{184}$$

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（$[\hat{j}_-, \hat{j}_-] = [\hat{j}_+, \hat{j}_+] = 0$）

$$[\hat{j}_+, \hat{j}_-] = [\hat{j}_x + i\hat{j}_y, \hat{j}_x - i\hat{j}_y] = -i[\hat{j}_x, \hat{j}_y] + i[\hat{j}_y, \hat{j}_x] = -ii\hat{j}_z + i(-i\hat{j}_z) = 2\hat{j}_z \tag{185}$$

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

$$\begin{aligned}[\hat{j}_z, \hat{j}_-] &= [\hat{j}_z, \hat{j}_x - i\hat{j}_y] = [\hat{j}_z, \hat{j}_x] - i[\hat{j}_z, \hat{j}_y] = i\hat{j}_y - i(-i\hat{j}_x) = -(\hat{j}_x - i\hat{j}_y) \\ &= -\hat{j}_- \qquad ([\hat{n}, \hat{a}] = -\hat{a}\text{と似ている}) \end{aligned}\tag{186}$$

$$[\hat{j}_z, \hat{j}_+] = \hat{j}_+ \qquad ([\hat{n}, \hat{a}^\dagger] = \hat{a}^\dagger\text{と似ている}) \tag{187}$$

$$[\hat{\boldsymbol{j}}^2, \hat{j}_-] = [\hat{\boldsymbol{j}}^2, \hat{j}_x - i\hat{j}_y] = [\hat{\boldsymbol{j}}^2, \hat{j}_x] - i[\hat{\boldsymbol{j}}^2, \hat{j}_y] = 0 \tag{188}$$

$$[\hat{\boldsymbol{j}}^2, \hat{j}_+] = 0 \tag{189}$$

$\hat{\boldsymbol{j}}^2$ の表記（後で使うための変形）：

$$\hat{\boldsymbol{j}}^2 = \hat{j}_x^2 + \hat{j}_y^2 + \hat{j}_z^2 \tag{190}$$

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

$$\hat{\boldsymbol{j}}^2 = \hat{j}_+\hat{j}_- - \hat{j}_z + \hat{j}_z^2 \tag{191}$$

また式 (185) より $\hat{j}_+\hat{j}_- = \hat{j}_-\hat{j}_+ + 2\hat{j}_z$ なので

$$\hat{\boldsymbol{j}}^2 = \hat{j}_-\hat{j}_+ + 2\hat{j}_z - \hat{j}_z + \hat{j}_z^2 = \hat{j}_-\hat{j}_+ + \hat{j}_z + \hat{j}_z^2 \tag{192}$$

## 5.4 固有状態

$\hat{\boldsymbol{j}}^2$ 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 $\lambda$、$m$ 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ないことに注意）：

$$\hat{\boldsymbol{j}}^2|\,\lambda, m\,\rangle = \lambda|\,\lambda, m\,\rangle \tag{193}$$

$$\hat{j}_z|\,\lambda, m\,\rangle = m|\,\lambda, m\,\rangle \tag{194}$$

$$\langle\,\lambda, m\,|\,\lambda, m\,\rangle = 1 \tag{195}$$

$\hat{j}_\pm$ を作用させたときの $\lambda$ の変化：式 (189)、式 (188) より

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

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

$\hat{j}_\pm$ を作用させたときの $m$ の変化：式 (186) と (187) 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 (190)（$\hat{\boldsymbol{j}}^2 = \hat{j}_x^2 + \hat{j}_y^2 + \hat{j}_z^2$）を状態 $|\,\lambda, m\,\rangle$ で挟むと

$$\langle\,\lambda, m\,|\hat{\boldsymbol{j}}^2|\,\lambda, m\,\rangle = \langle\,\lambda, m\,|\hat{j}_x^2|\,\lambda, m\,\rangle + \langle\,\lambda, m\,|\hat{j}_y^2|\,\lambda, m\,\rangle + \langle\,\lambda, m\,|\hat{j}_z^2|\,\lambda, m\,\rangle \tag{196}$$

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

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

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 (196) より

$$\lambda = \underbrace{\langle\,\lambda, m\,|\hat{j}_x^2|\,\lambda, m\,\rangle + \langle\,\lambda, m\,|\hat{j}_y^2|\,\lambda, m\,\rangle}_{\geq 0} + m^2 \tag{197}$$

$$\lambda \geq m^2 \geq 0 \quad (\hat{j}_z\text{がエルミートなので } m \text{ は実数}) \tag{198}$$

となるが、この意味は

- $\lambda$ 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

$$\hat{j}_+|\,\lambda, j\,\rangle = \mathbf{0} \tag{199}$$

となる。ここで式 (192) の $\hat{\boldsymbol{j}}^2$ の表式を $|\,\lambda, j\,\rangle$ に作用させると

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

つまり

$$\lambda = j(j+1) = j^2 + j \tag{200}$$

一方 $|\,\lambda, j\,\rangle$ に消滅演算子 $\hat{j}_-$ を作用させることで $m = j-1, j-2, \cdots$ 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

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

となる $n$ が存在する。式 (191) の $\hat{\boldsymbol{j}}^2$ の表式を $|\,\lambda, j-n\,\rangle$ に作用させると

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

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、

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

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、

$$\lambda = j(j+1) \tag{201}$$

$$m = j, j-1, \cdots, -j+1, -j \tag{202}$$

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