軌道角運動量：対称性と保存量 (続き２)

角運動量の固有状態に関する代数的取扱い

角運動量の固有関数にたいする関係式 (35)(40) を、具体的な固有関数の形を定めてから示した。(40) の導出はかなり難しいというべきだろう。実際にはこれらの式は固有関数の具体的な形を知らなくても交換関係 ($41a \sim c$) だけから決める事ができる。これについて説明しよう。固有関数を

$$\hat{\ell}^2\varphi_{jm} = \hbar^2\lambda_j\varphi_{jm}, \qquad \hat{\ell}_z\varphi_{jm} = \hbar m\varphi_{jm} \tag{42}$$

とする。(27) を導く際には$\hat{\ell}^2 = \hat{\ell}_x^2 + \hat{\ell}_y^2 + \hat{\ell}_z^2$ と$\hat{\ell}_x$, $\hat{\ell}_y$のエルミート性しか使わなかった。したがって (42) に対しても全く同様にして

$$\lambda_j \geq m^2 \geq 0$$

が示される。つまり m には上限と下限がある事がまず分かる。次に (41b) の交換子 $[\hat{\ell}_z, \hat{\ell}_\pm] = \pm\hbar\hat{\ell}_\pm$ をφ_{jm}に作用させると

$$\hat{\ell}_z\hat{\ell}_\pm\varphi_{jm} = \hat{\ell}_\pm\hat{\ell}_z\varphi_{jm} \pm \hbar\hat{\ell}_\pm\varphi_{jm} = \hbar(m\pm 1)\hat{\ell}_\pm\varphi_{jm}$$

となる。したがって$\hat{\ell}_\pm\varphi_{jm}$は$\hat{\ell}_z$の固有値$\hbar(m\pm 1)$ に属する固有関数となっている。これを

$$\hat{\ell}_\pm\varphi_{jm} = C_{jm}^{(\pm)}\varphi_{jm\pm 1} \tag{43}$$

と書いておこう。

λ_jを固定した時の m の上限値を m_U、下限値を m_Lとすると

$$\hat{\ell}_+\varphi_{jm_U} = 0, \qquad \hat{\ell}_-\varphi_{jm_L} = 0 \tag{44}$$

でなくてはならない。前者に$\hat{\ell}_-$を、後者に$\hat{\ell}_+$を演算し (41c) を用いて (42) によって変形すると

$$\hat{\ell}_-\hat{\ell}_+\varphi_{jm_U} = (\hat{\ell}^2 - \hat{\ell}_z^2 - \hbar\hat{\ell}_z)\varphi_{jm_U} = \hbar^2(\lambda_j - m_U^2 - m_U)\varphi_{jm_U} = 0,$$

$$\hat{\ell}_+\hat{\ell}_-\varphi_{jm_L} = (\hat{\ell}^2 - \hat{\ell}_z^2 + \hbar\hat{\ell}_z)\varphi_{jm_L} = \hbar^2(\lambda_j - m_L^2 + m_L)\varphi_{jm_L} = 0$$

となる。したがって

$$\lambda_j = m_U^2 + m_U = m_L^2 - m_L \tag{45}$$

である。また (43) より m のとり得る値は差 1 の数（まだ整数かどうかは何も言っていない）であるから

$$m_U - m_L = \text{正整数}\quad \text{叉は}\ 0$$

であり、したがって (45) から

$$m_U = -m_L \geq 0$$

でなくてはならない。この事 $(m_U - m_L = \text{整数叉は}\ 0, m_U + m_L = 0)$ は m が半整数叉は 0 であることを意味している。m の上限値 m_Uを jと書くと、$2j$は 0 または正整数となる。したがって

$$j = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \cdots \tag{46}$$

であり、また (45) により

$$\lambda_j = j(j+1) \tag{47}$$

となる。(47) と (35a) を比べると、ここで jと書いたものが今まで ℓと書いたものに対応していることが分かる。

さらに (43) を用いて内積 $\langle \hat{\ell}_\pm \varphi_{jm} | \hat{\ell}_\pm \varphi_{jm} \rangle$ を計算することができる。これは

$$\begin{aligned}
\langle \hat{\ell}_\pm \varphi_{jm} | \hat{\ell}_\pm \varphi_{jm} \rangle &= |C_{jm}^{(\pm)}|^2 \langle \varphi_{jm\pm1} | \varphi_{jm\pm1} \rangle = |C_{jm}^{(\pm)}|^2 \\
&= \langle \varphi_{jm} | \hat{\ell}_\mp \hat{\ell}_\pm \varphi_{jm} \rangle = \langle \varphi_{jm} | (\hat{\ell}^2 - \hat{\ell}_z^2 \mp \hbar \hat{\ell}_z) \varphi_{jm} \rangle \\
&= \langle \varphi_{jm} | \hbar^2 (j(j+1) - m^2 \mp m) \varphi_{jm} \rangle = \hbar^2 (j \mp m)(j \pm m + 1).
\end{aligned}$$

したがって (43) の数係数は

$$C_{jm}^{(\pm)} = \hbar \sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)} \tag{48}$$

となる。ここで位相因子は決まらないが、通常 1 にとる。

以上のようにして (27),(35a),(35b),(40) 等の関係が決まる。ただし注意しておきたいのは、上の議論からは ℓの値（ここでは jと書いた）は (46) のように 0 叉は整数叉は半奇整数と定まり、必ずしも整数とはならない事である。しかし我々は波動関数を具体的に思いえがくことにより, ℓの値が半奇整数の場合には波動関数が空間的に一価ではなくなるのでここでは許されないことを知っているのである。jが半奇性数になる例の 1 つは、ポイント 8 で学ぶ $j = 1/2$ のスピンの場合である。

無限小変換に対する不変量

ポイント 5 で学んだようにハミルトニアンは時間発展演算子と関係していてそれに対する不変量がエネルギーである。同様に運動量保存や角運動量保存の法則も、一般的な系の対称性と結びついている。

//

//

/////////図 6-3/////////////////////////////

//

//

//

座標軸を$\delta \boldsymbol{r}$だけ平行移動した新しい座標系を考えよう。(図 6.3a) 古い座標系で $\boldsymbol{r}$ にあった点は新しい座標系では

$$\boldsymbol{r}' = \boldsymbol{r} - \delta \boldsymbol{r} \tag{49}$$

に移る。一方、運動量は 2 つの座標系で等しく

$$\boldsymbol{p}' = \boldsymbol{p} \tag{49'}$$

のままである。古い座標系であらわした波動関数をψと書き、座標変換後の系でのそれをψ'と書くことにする。$\boldsymbol{r}$ と $\boldsymbol{r}'$は同じ点なのだから (49) の

ように座標変換されても波動関数の値は等しくなければならない：

$$\psi'(\boldsymbol{r}') = \psi(\boldsymbol{r}) = \psi(\boldsymbol{r}' + \delta\boldsymbol{r}).$$

あるいは $\boldsymbol{r}'$を改めて $\boldsymbol{r}$ と書き直し、さらに$\delta\boldsymbol{r}$についてテイラー展開すると

$$\begin{aligned}\psi'(\boldsymbol{r}) &= \psi(\boldsymbol{r}+\delta\boldsymbol{r}) \cong \psi(\boldsymbol{r}) + \delta\boldsymbol{r}\cdot\nabla\psi(\boldsymbol{r}) = \psi(\boldsymbol{r}) + \frac{i}{\hbar}\delta\boldsymbol{r}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}\psi(\boldsymbol{r}) \\ &= (1 + \frac{i}{\hbar}\delta\boldsymbol{r}\cdot\hat{\boldsymbol{p}})\psi(\boldsymbol{r})\end{aligned} \tag{50}$$

となる。この式は無限小の座標変換 (49) を表す演算子が

$$U_{\delta\boldsymbol{r}} = 1 + \frac{i}{\hbar}\delta\boldsymbol{r}\cdot\hat{\boldsymbol{p}} \tag{51}$$

であることを意味している。この座標変換に対応してハミルトニアンも変換を受けるが、それは

$$H' = U_{\delta\boldsymbol{r}} H U_{\delta\boldsymbol{r}}^{-1} = H - \frac{i}{\hbar}[H, \delta\boldsymbol{r}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}] + O(\delta\boldsymbol{r}^2) \tag{52}$$

となる。したがって、このような無限小の平行移動に対してハミルトニアンが不変であるということ $H = H'$と、運動量$\hat{\boldsymbol{p}}$の移動方向成分がハミルトニアンと交換するということが等価であることが分る。逆に系の中にその一様性を破るポテンシャルがあるならば、そのポテンシャルによって粒子は散乱されて運動量のやり取りが行われ、運動量は保存されない。($[H, \hat{\boldsymbol{p}}] \neq 0$)

次に座標軸を、固定された単位ベクトル $\boldsymbol{e}(|\boldsymbol{e}| = 1)$ のまわりに$\delta\theta$だけ回転したような新しい座標系を考えよう。（図 6.3b）この時、古い座標系で $\boldsymbol{r}$ にあった点は新しい座標系では

$$\boldsymbol{r}' = \boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}\times\boldsymbol{e}\delta\theta = \boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}'\times\boldsymbol{e}\delta\theta \tag{53}$$

に移る。前と同様に古い座標系であらわした波動関数をψと書き、座標変換後のそれをψ'と書くと

$$\psi'(\boldsymbol{r}') = \psi(\boldsymbol{r}) = \psi(\boldsymbol{r}' + \boldsymbol{r}'\times\boldsymbol{e}\delta\theta)$$

である。あるいはテイラー展開すると

$$
\begin{aligned}
\psi'(\boldsymbol{r}) &= \psi(\boldsymbol{r} + \boldsymbol{r} \times \boldsymbol{e}\delta\theta) \cong (1 + \delta\theta \boldsymbol{r} \times \boldsymbol{e} \cdot \nabla)\psi(\boldsymbol{r}) \\
&= (1 - \delta\theta \boldsymbol{e} \cdot (\boldsymbol{r} \times \nabla))\psi(\boldsymbol{r}) = (1 - \frac{i}{\hbar}\delta\theta \boldsymbol{e} \cdot \hat{\ell})\psi(\boldsymbol{r})
\end{aligned}
\tag{54}
$$

となる。ここで角運動量演算子$\hat{\ell} = \boldsymbol{r} \times \hat{\boldsymbol{p}}$ があらわれた。つまり無限小の回転をあらわす演算子が

$$
U_{\delta\theta} = 1 - \frac{i}{\hbar}\delta\theta \boldsymbol{e} \cdot \hat{\ell} \tag{55}
$$

であることを意味している。またこの無限小変換$U_{\delta\theta}$に対してハミルトニアンは

$$
H' = U_{\delta\theta} H U_{\delta\theta}^{-1} = H + \frac{i}{\hbar}[H, \delta\theta \boldsymbol{e} \cdot \hat{\ell}] + O(\delta\theta^2) \tag{56}
$$

となる。したがって無限小回転でハミルトニアンが不変であるということ$H' = H$と、その回転軸方向の角運動量成分 $\boldsymbol{e} \cdot \hat{\ell}$ とハミルトニアンが交換するということが同じことであることが理解できる。

（軌道角運動量の項 終り）