4.5 (一般)角運動量の固有値問題

定義4.5 $\mathcal{H}$上のエルミートops. $\hat{J}_k$ ($k\in\{1,2,3\}$) が以下をみたすとき、(一般)角運動量op.であるという。　(例)軌道角運動量op.(P17)

$$[\hat{J}_j,\hat{J}_k]=i\epsilon_{jk\ell}\hat{J}_\ell$$

ℓについての和

命題4.6 $\hat{\vec{J}}^2:=\sum_{k=1}^{3}\hat{J}_k^2$ とすると、$[\hat{\vec{J}}^2,\hat{J}_k]=0$ $({}^\forall k)$

注4.7 $[\hat{\vec{J}}^2,\hat{J}_3]=0 \Rightarrow \hat{\vec{J}}^2$と$\hat{J}_3$の同時固有状態 $|\lambda, m\rangle$ が存在

今は要らない

$\hat{\vec{J}}^2$の固有値のラベル　$\hat{J}_3$

λ,を省略

$$\begin{cases}\hat{\vec{J}}^2|m\rangle=\lambda|m\rangle \cdots ③\\ \hat{J}_3|m\rangle=m|m\rangle \cdots ④\end{cases}$$

これを解く　($\langle m|m\rangle=1$とする)

③より $\lambda=\langle m|\hat{\vec{J}}^2|m\rangle=\sum_{k=1}^{3}\left|\hat{J}_k|m\rangle\right|^2\geq 0$

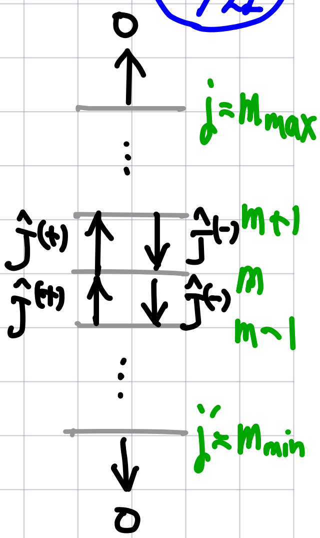
'21 11/22

昇降ops.をdef:

$$\hat{J}^{(\pm)}:=\hat{J}_1\pm i\hat{J}_2$$

(以後複号同順)

このとき
$$\begin{cases}[\hat{\vec{J}}^2,\hat{J}^{(\pm)}]=0 & \cdots ⑤\\ \hat{J}_3\hat{J}^{(\pm)}=\hat{J}^{(\pm)}(\hat{J}_3\pm 1) & \cdots ⑥\\ \hat{J}^{(\pm)}\hat{J}^{(\mp)}=\hat{\vec{J}}^2-\hat{J}_3^2\pm\hat{J}_3 & \cdots ⑦\end{cases}$$



補題4.8 $\hat{J}^{(\pm)}|m\rangle$は$\hat{J}_3$の固有ベクトルで固有値は$(m\pm1)$

宿題1　⑦を示せ　(複号のどちらか一方だけでよい)

∵ $\hat{J}_3\hat{J}^{(\pm)}|m\rangle \overset{⑥}{=} \hat{J}^{(\pm)}(\hat{J}_3\pm1)|m\rangle=(m\pm1)\hat{J}^{(\pm)}|m\rangle$ ∎

命題4.9 $\hat{J}_3$の固有値mには最大値・最小値がある。

また $j:=m_{max}$ として $m=\underbrace{j, j-1, \cdots, -j}_{(2j+1)コ}$ であり、$\lambda=j(j+1)$

∵ $(\hat{J}_1^2+\hat{J}_2^2)|m\rangle = (\hat{\vec{J}}^2-\hat{J}_3^2)|m\rangle = (\lambda - m^2)|m\rangle$

∴ $\langle m|(\quad〃\quad)|m\rangle = \lambda - m^2 \geqq 0$ ∴ mに最大・最小あり.

$j := m_{max}$, $j' := m_{min}$ とする: $\hat{J}^{(+)}|m=j\rangle = 0$, $\hat{J}^{(-)}|m=j'\rangle = 0$

∴ $\hat{J}^{(-)}\hat{J}^{(+)}|m=j\rangle \overset{⑦}{=} (\hat{\vec{J}}^2-\hat{J}_3^2-\hat{J}_3)|m=j\rangle = (\lambda - j^2 - j)|m=j\rangle = 0$

$\hat{J}^{(+)}\hat{J}^{(-)}|m=j'\rangle \overset{〃}{=} (\hat{\vec{J}}^2-\hat{J}_3^2+\hat{J}_3)|m=j'\rangle = (\lambda - j'^2 + j')|m=j'\rangle = 0$

$$\therefore \begin{cases} \lambda = j(j+1) \\ \lambda = j'(j'-1) \end{cases} \Rightarrow (j+j')\overbrace{(j-j'+1)}^{>0\ (\because\ j\geqq j')} = 0 \Rightarrow j' = -j \quad \blacksquare$$

<u>系4.10</u> $j = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \cdots$ ∵ 固有値の間隔の数 $= 2j \in \mathbb{Z}$

(例) $j=0$ のとき $m=0$, $\lambda=0$

$j=\frac{1}{2}$ 〃 $m=\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$, $\lambda=\frac{3}{4}$

$j=1$ 〃 $m=1, 0, -1$, $\lambda=2$

← 位相因子=1とした

<u>補題4.11</u> $\hat{J}^{(\pm)}|j,m\rangle = \sqrt{(j\mp m)(j\pm m+1)}\,|j,m\pm 1\rangle$

↖ $|m\rangle$を改めてこう書いた

∵ 補題4.8より、$\hat{J}^{(\pm)}|m\rangle = a_m^{(\pm)}|m\pm 1\rangle$ と書ける.

$\langle m-1|\hat{J}^{(-)}|m\rangle = a_m^{(-)}\langle m-1|m-1\rangle = a_m^{(-)}$

‖

$(\hat{J}^{(+)}|m-1\rangle)^\dagger|m\rangle = \overline{a_{m-1}^{(+)}}\langle m|m\rangle = \overline{a_{m-1}^{(+)}}$

一方、$\langle m|\hat{J}^{(-)}\hat{J}^{(+)}|m\rangle = |\hat{J}^{(+)}|m\rangle|^2 = |a_m^{(+)}|^2$

‖

$\langle m|(\hat{\vec{J}}^2-\hat{J}_3^2-\hat{J}_3)|m\rangle = j(j+1)-m(m+1) = (j-m)(j+m+1)$ $\blacksquare$

4.6 軌道角運動量の固有値問題

4.3節に戻る。$\hat{\vec{L}} =: \hbar \hat{\vec{M}}$ とすれば。$\hat{\vec{M}}$ は一般角運動量 op. の一例.

$$\begin{cases} M_x = \dfrac{1}{i}\left(-\sin\phi \dfrac{\partial}{\partial\theta} - \cos\phi \cot\theta \dfrac{\partial}{\partial\phi}\right) \\ M_y = \dfrac{1}{i}\left(\cos\phi \dfrac{\partial}{\partial\theta} - \sin\phi \cot\theta \dfrac{\partial}{\partial\phi}\right) \\ M_z = \dfrac{1}{i}\dfrac{\partial}{\partial\phi} \quad \cdots ⑦ \end{cases}$$

$\cot x := \dfrac{1}{\tan x}$

$\vec{M}^2 Y(\theta,\phi) = \lambda Y(\theta,\phi)$ を解く. (λ, Y を求める)

$$M^{(\pm)} := M_x \pm i M_y \underset{\xi := \cos\theta}{=} e^{\pm i\phi}\left(\mp\sqrt{1-\xi^2}\frac{\partial}{\partial\xi} - \frac{\xi}{\sqrt{1-\xi^2}}\frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial\phi}\right)$$

$(0 \leq \theta \leq \pi)$ $\quad (\sin\theta = \sqrt{1-\xi^2})$

$$\vec{M}^2 = -\frac{\partial}{\partial\xi}(1-\xi^2)\frac{\partial}{\partial\xi} - \frac{1}{1-\xi^2}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}$$

$Y_m(\theta,\phi) := \langle \xi, \phi | m \rangle$ とすると. ← ③,④ のその

④と⑦

$$M^{(\pm)} Y_m = e^{\pm i\phi}\left(\mp\sqrt{1-\xi^2}\frac{\partial}{\partial\xi} - \frac{m\xi}{\sqrt{1-\xi^2}}\right) Y_m$$

$$= \mp e^{\pm i\phi}\left(\sqrt{1-\xi^2}\right)^{\pm m+1}\frac{\partial}{\partial\xi}\left(\sqrt{1-\xi^2}\right)^{\mp m} Y_m$$

$j = m_{max}$ を l と書く

$$M^{(+)} Y_l = 0 \Rightarrow \left(\sqrt{1-\xi^2}\right)^{-l} Y_l = \text{const.} \quad \cdots ⑧$$

ξ によらない

宿題2

これを示せ (e.g. 帰納法)

一方. $n \in \mathbb{Z}_{>0}$ に対して

$$(M^{(-)})^n Y_m = e^{-in\phi}\left(\sqrt{1-\xi^2}\right)^{-m+n}\frac{\partial^n}{\partial\xi^n}\left(\left(\sqrt{1-\xi^2}\right)^m Y_m\right) \quad \cdots ⑨$$

$\downarrow m = l,\ n = 2l+1$

$$(M^{(-)})^{2l+1} Y_l = e^{-i(2l+1)\phi}\left(\sqrt{1-\xi^2}\right)^{l+1}\frac{\partial^{2l+1}}{\partial\xi^{2l+1}}\left(\left(\sqrt{1-\xi^2}\right)^l Y_l\right) = 0$$

$$\therefore \frac{\partial^{2l+1}}{\partial \xi^{2l+1}}\left\{ \underbrace{\left(\sqrt{1-\xi^2}\right)^l Y_l}_{\parallel} \right\} = 0$$

∴ ξの$2l$次の多項式 … ⑩

jと違って $\frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \cdots$ はない

⑩ ÷ ⑧ ⇒ $(1-\xi^2)^l = $ (ξの$2l$次の多項式) ⇒ $l \in \mathbb{Z}_{\geq 0}$

〈波動関数〉

$$\vec{M}^2 \underbrace{Y_m(\theta,\phi)}_{\parallel} = l(l+1) Y_m(\theta,\phi) \leftarrow ①$$

↓ $F_m(\xi)\, e^{im\phi}$: 変数分離(可能)

$$\left(\frac{d}{d\xi}(1-\xi^2)\frac{d}{d\xi} - \frac{m^2}{1-\xi^2} + l(l+1)\right) F_m(\xi) = 0$$: ルジャンドル陪微分方程式

⑧: $Y_{l,l} = a_l \left(\sqrt{1-\xi^2}\right)^l e^{il\phi} = a_l \sin^l\theta\, e^{il\phi}$ … ⑪

$a_l = \frac{(-1)^l}{2^l\, l!}\sqrt{\frac{(2l+1)!}{4\pi}}$ 規格化(P18) ← $\int_{-1}^{1}(1-\xi^2)^l d\xi = \frac{2^{2l+1}(l!)^2}{(2l+1)!}$

↓ $(M^{(-)})^{l-m}$

$$Y_{l,m}(\theta,\phi) \overset{4.11}{=} \frac{1}{\sqrt{(l+m+1)(l-m)}} M^{(-)} Y_{l,m+1} = \cdots$$

$$= \sqrt{\frac{(l+m)!}{(l-m)!\,(2l)!}} \left(M^{(-)}\right)^{l-m} Y_{l,l}$$

$$\underset{\text{\&}\ ⑪}{\overset{⑨:\ n=l-m,\ m=l}{=}} \frac{(-1)^l}{2^l\, l!}\sqrt{\frac{(l+m)!\,(2l+1)}{4\pi\,(l-m)!}}\ \frac{e^{im\phi}}{\left(\sqrt{1-\xi^2}\right)^m}\ \frac{d^{l-m}}{d\xi^{l-m}}(1-\xi^2)^l$$

球面調和関数 (≒ $e^{im\phi}$を除けば ルジャンドル陪関数)

(SO(3)の既約表現のbasis)

〈水素原子まとめ〉

束縛状態 $\varphi_{n,l,m}(\vec{r}) = R_n(r)\,Y_{l,m}(\theta,\phi)$

$$\varphi_{n,l,m}(\vec{r}) = \langle \vec{r} \mid n, l, m \rangle$$

n: 主量子数 (エネルギー準位のラベル) $\in \{1, 2, \cdots\}$

l: 方位 〃 $\in \{0, 1, \cdots, n-1\}$ nコ

m: 磁気 〃 $\in \{-l, \cdots, l\}$ $(2l+1)$コ

n-th 励起状態に入りうる電子数 $= \sum_{l=0}^{n-1}(2l+1)\times\underbrace{2}_{\text{電子の}\uparrow\downarrow\text{の自由度（スピン）}} = 2n^2$

2 K殻
8 L 〃
18 M 〃
⋮
(魔法数)