

6. 角運動量

本章では、量子力学における角運動量(angular momentum)を取り扱う。角運動量には「軌道角運動量(orbital angular momentum)」と量子の内部自由度としての「スピン角運動量」がある。軌道角運動量に関しては、古典力学に対応する演算子として話を進め、その後、交換関係を導入し固有値方程式を求める。その解は、「解析的な方法」でも「代数的」にも解くことができるが、本講義では「解析的な手法」を示す(「代数的な方法」はこの章の演習と秋学期の量子力学Bで取り扱う)。その解では、量子の回転の大きさや回転軸の傾きがとびとびになることが示される。

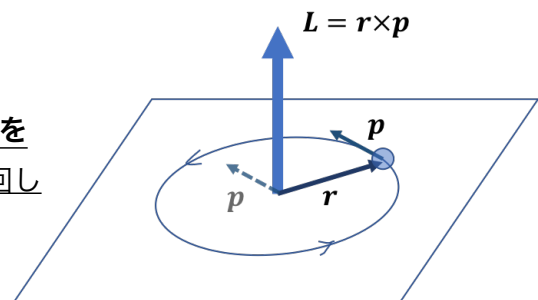
スピン角運動量は古典論での対応物は無く¹、スピンと空間座標は独立した自由度である(スピンの関しては、量子力学の原理を議論する際、3章で一部取り上げた)。スピン角運動量も軌道角運動量と基本的には同じ性質を持つが、スピンの大きさが半整数を取り得る。この事は軌道角運動量の解析的な取り扱いでは出て来なく、代数的な方法が必要となる。なので、本章では簡単に触れるのにとどめた。

6-1. 古典力学での軌道角運動量

古典力学では、角運動量 $\mathbf{L}$ は空間的に広がった運動に対して、位置ベクトル $\mathbf{r}$ と運動量ベクトル $\mathbf{p}$ の外積(ベクトル積)

$$\mathbf{L} \equiv \mathbf{r} \times \mathbf{p} \quad (6-1-1)$$

で定義される。イメージとしては、粒子は $\mathbf{L}$ に垂直な面内を回っている。その回転の向きは、回転に沿って右ネジを回したとき、 $\mathbf{L}$ 方向に進むような向きになっている。 $\mathbf{L}$ が $-\mathbf{L}$ になれば同じ面を反対向きに回っていることになる。



式(6-1-1)を直交成分で表すと、

$$\begin{cases} L_x = yp_z - zp_y \\ L_y = zp_x - xp_z \\ L_z = xp_y - yp_x \end{cases} \quad (6-1-2)$$

となる。ただし、 $\mathbf{L} = (L_x, L_y, L_z)$ 、 $\mathbf{r} = (x, y, z)$ 、 $\mathbf{p} = (p_x, p_y, p_z)$ とした²。

古典力学では、当然ではあるが、回転運動(例えばコマ)は、その「回転の程度(角運動量のベクトルの大きさ)」や「回転軸の向き(角運動量のベクトルの向き)」を自由に決めることができる。

すなわち、

- ・ $\mathbf{L}$ の大きさや向きは連続的に変化できる
- ・ L_x, L_y, L_z すべての成分を同時に正確に決めることができる

¹ あえて言うなら粒子の自旋に対応する角運動量。これに対して軌道角運動量は原子核などの周りの公転運動に対応する。

² この講義では Levi Civita などの記号は使わない。

6-2. 角運動量演算子と交換関係

量子力学では、軌道角運動量 $\mathbf{L}$ に対応するエルミート演算子 $\hat{\mathbf{L}}$ を導入する。ここで、 $\hat{\mathbf{L}} = (\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z)$ である。式(6-1-2)に対応して、

$$\begin{cases} \hat{L}_x = \hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y \\ \hat{L}_y = \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z \\ \hat{L}_z = \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x \end{cases} \quad (6-2-1)$$

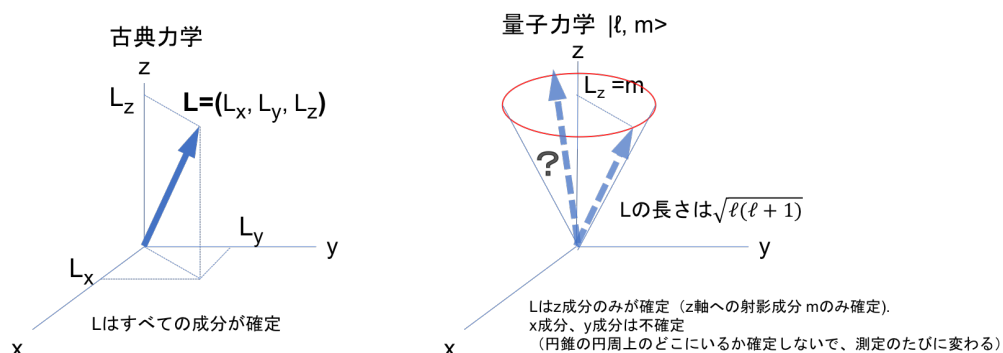
とおく。 $\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z$ がエルミート演算子であることはすぐに示せる³。

$\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z$ の間には次の交換関係があることを式(6-2-1)より示せる⁴。

$$\begin{cases} [\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar\hat{L}_z \\ [\hat{L}_y, \hat{L}_z] = i\hbar\hat{L}_x \\ [\hat{L}_z, \hat{L}_x] = i\hbar\hat{L}_y \end{cases} \quad (6-2-2)$$

式 (6-2-2) より、 $\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z$ はどれも交換可能ではなく、同時固有状態を持たないことがわかる。すなわち、どれか一つの成分を決めれば、他の成分は正確に決めることができない（**不確定性関係がある**）。たとえば $\hat{L}_z$ の固有状態 $|m\rangle$ では、 L_z を測定すれば $\hat{L}_z$ の固有値 m がいつも観測されるが、この状態において、 L_x や L_y を測定すると、測定のたびに $\hat{L}_x$ や L_y のいくつかある固有値のどれかが確率的に出現するので L_x や L_y 成分は確定しない。

古典力学では、 L_x, L_y, L_z すべての成分を同時に正確に決めることができるので角運動量ベクトルの向きが一義的に決めることができたが、量子力学的な角運動量はそれができない。今の例では、角運動量の z 成分 $L_z = m$ が決まっても（従って、 z 軸からの傾きは決まっても）、その x, y 成分は不確定性関係により確定的に決めることはできない（測定すると、下の図の円すい上のどこかに観測される）。また、 z 軸と平行な方向を向くこともできない。 z 軸と平行な場合、 $L_x = 0, L_y = 0, L_z = l$ (l は m の最大値) となり、すべての成分が確定してしまうので不確定性関係に反するからである（実際、後で示すように、 L の長さ $\sqrt{l(l+1)}$ は z 成分の最大値 $L_z = l$ より大きい。）



³ $L_x^\dagger = L_x$ などを示せば良い。このとき、異なる成分同士の位置座標と運動量は交換する事に注意。例えば、 $[x, p_y] = [z, p_x] = 0$

⁴ 演習

ところで、(6-2-2)と同等な交換関係が、すでに「スピン演算子」 $\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z$ の交換関係として(3-6-9)式に登場している。3-1-1節でも述べたが、そこでは簡単のために電子のスピンをの大きさを1として話を進めた。実際には、電子のスピン大きさは $\frac{1}{2}\hbar$ なので⁵、改めてスピン角運動量を S と書くこととし、対応する演算子を

$$\hat{S}_x \equiv \frac{1}{2}\hbar\sigma_x, \hat{S}_y \equiv \frac{1}{2}\hbar\sigma_y, \hat{S}_z \equiv \frac{1}{2}\hbar\sigma_z \quad (6-2-3)$$

のように定義する。こうすると、 $\hat{S}_x, \hat{S}_y, \hat{S}_z$ の間にも(6-2-2)と全く同じ交換関係が成り立つ。

$$[\hat{S}_x, \hat{S}_y] = i\hbar\hat{S}_z, [\hat{S}_y, \hat{S}_z] = i\hbar\hat{S}_x, [\hat{S}_z, \hat{S}_x] = i\hbar\hat{S}_y \quad (6-2-4)$$

スピン角運動量は式(6-1-1)のように、 $\hat{\mathbf{r}}$ と $\hat{\mathbf{p}}$ で表すことはできないことを注意しておく。それはスピン角運動量が「空間座標」とは独立した全く新しい「内部自由度」であって、古典物理学に対応するものがないからである。しかしながら、式(6-2-2)は、軌道角運動量でもスピン角運動量でも同じ交換関係（そして、不確定性関係）を持つことを示している。

・角運動量の大きさの2乗の演算子

続いて、 L^2 に対応する演算子、

$$\hat{L}^2 \equiv \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2 \quad (6-2-5)$$

を導入する。 $\hat{L}^2$ と $\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z$ の間の交換関係は⁶、

$$\begin{cases} [\hat{L}^2, \hat{L}_x] = 0 \\ [\hat{L}^2, \hat{L}_y] = 0 \\ [\hat{L}^2, \hat{L}_z] = 0 \end{cases} \quad (6-2-6)$$

となる。(6-2-6)式より、 $\hat{L}^2$ と $\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z$ は交換可能であり、同時固有状態を持つことがわかる。

したがって、 $\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z$ の間の不確定性を考慮すると、 L^2 と L_x, L_y, L_z のどれか一つは観測が両立し、確定値を持つ。すなわち、量子力学においては、我々が角運動量に関して得られる情報は限られていて、 L^2 （角運動量の大きさの2乗）と L の成分のどれか一つだけ（普通この成分を L_z とおく）となる。

⁵ 一般にスピン角運動量は（ $\hbar$ バーの単位で）整数だけでなく半整数の大きさも持てる。軌道角運動量は後で示すように整数の大きさを持つ。

⁶ 演習

6-3. 軌道角運動量のケット版固有値方程式とその座標表示

6-3-1 ケット版固有値方程式

前節の結論（全頁、下から3行の文章）は、逆の言い方をすると、「量子力学的には角運動量の状態は $\hat{L}^2$ と $\hat{L}_z$ の固有値（量子数）を指定すれば完全に決まる」ということになる。

そこで、 $\hat{L}^2$ と $\hat{L}_z$ のケット版固有値方程式を

$$\begin{cases} \hat{L}^2 |l, m\rangle = l(l+1)\hbar^2 |l, m\rangle \\ \hat{L}_z |l, m\rangle = m\hbar |l, m\rangle \end{cases} \quad (6-3-1)$$

とおくことにする。ここで、 $|l, m\rangle$ は $\hat{L}^2$ と $\hat{L}_z$ の同時固有状態、その状態での $\hat{L}^2$ の固有値を $l(l+1)\hbar^2$ 、 $\hat{L}_z$ の固有値を $m\hbar$ とおいた。なぜ $\hat{L}^2$ の固有値を $l^2\hbar^2$ ではなく $l(l+1)\hbar^2$ とおいたのかは後で触れる。

式(6-3-1)を書き下したが、まだ、 $|l, m\rangle$ の具体的な形や固有値の値がどんな値をとるか（ l や m がどんな値を取り得るか）についてはわかっていない。これを解く方法として、代数的な方法と解析的な方法があるが、本講義では解析的な手法で進める⁷。

6-3-2. 固有状態と固有値方程式の座標表示（3次元）

まず、 $|l, m\rangle$ の位置表示での固有関数を考える（ $\varphi_{l,m}$ と書く事にする）。

これまでは、1次元的なポテンシャル下での運動を取り扱ってきたので固有状態の左から $\langle x|$ をかけることで位置表示の固有関数を求めてきた（前章の調和振動子を代数的に解いた5-3-3節、(5-3-24)(5-3-25)式参照）。

しかし、軌道角運動量を扱うような場合、3次元的に取り扱う必要がある。 $\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}$ はすべて交換するので、それらの同時固有状態を $|\mathbf{r}\rangle \equiv |x, y, z\rangle$ 、固有値を x, y, z とおくと、

$$\begin{cases} \hat{x} |\mathbf{r}\rangle = x |\mathbf{r}\rangle \\ \hat{y} |\mathbf{r}\rangle = y |\mathbf{r}\rangle \\ \hat{z} |\mathbf{r}\rangle = z |\mathbf{r}\rangle \end{cases} \quad (6-3-2)$$

と書ける。以下、3次元的な位置演算子として、 $\hat{\mathbf{r}} = (\hat{x}, \hat{y}, \hat{z})$ を導入する。こうすると、式 (6-3-2) は、

$$\hat{\mathbf{r}} |\mathbf{r}\rangle = \mathbf{r} |\mathbf{r}\rangle \quad (6-3-3)$$

のようにまとめて書く事ができる（ただし、 $\mathbf{r} = (x, y, z)$ ）。

$|l, m\rangle$ を $|\mathbf{r}\rangle$ を基底とした複素ベクトル空間で表すとすると、(5-3-24)(5-3-25)式と同様に、

$$|l, m\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi_{l,m}(\mathbf{r}) |\mathbf{r}\rangle d\mathbf{r} \quad (6-3-4)$$

$$\varphi_{l,m}(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} | l, m \rangle \quad (6-3-5)$$

⁷ 代数的な方法の一部は演習。詳細は秋学期の量子力学Bで取り扱う。

となる⁸。ここで、 $\varphi_{l,m}(\mathbf{r})$ が位置表示での $\hat{L}^2$ と $\hat{L}_z$ の (同時) 固有関数である。

式 (6-3-1) に左から $\langle \mathbf{r} |$ をかけると、

$$\langle \mathbf{r} | \hat{L}^2 | l, m \rangle = l(l+1)\hbar^2 \langle \mathbf{r} | l, m \rangle \quad (6-3-6)$$

$$\langle \mathbf{r} | \hat{L}_z | l, m \rangle = m\hbar \langle \mathbf{r} | l, m \rangle \quad (6-3-7)$$

が得られる。

まず、(6-3-7) 式から位置表示の固有値方程式を求める。

左辺は、

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{r} | \hat{L}_z | l, m \rangle &= \langle \mathbf{r} | (\hat{x}\hat{p}_y - y\hat{p}_x) | l, m \rangle \\ &= \langle \mathbf{r} | \hat{x}\hat{p}_y | l, m \rangle - \langle \mathbf{r} | \hat{y}\hat{p}_x | l, m \rangle \end{aligned} \quad (6-3-8)$$

$\langle \mathbf{r} | \hat{x} = \langle \mathbf{r} | x$ 、 $\langle \mathbf{r} | \hat{y} = \langle \mathbf{r} | y$ 、なので(6-3-8)は

$$x \langle \mathbf{r} | \hat{p}_y | l, m \rangle - y \langle \mathbf{r} | \hat{p}_x | l, m \rangle \quad (6-3-9)$$

ここで、(5-3-27)式 $\langle x | \hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \langle x |$ が他の成分でも同様に成り立つと考えれば、

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{r} | \hat{p}_x &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \langle \mathbf{r} |, \\ \langle \mathbf{r} | \hat{p}_y &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial y} \langle \mathbf{r} |, \\ \langle \mathbf{r} | \hat{p}_z &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial z} \langle \mathbf{r} | \end{aligned} \quad (6-3-10)$$

と書けるので、式(6-3-9)は

$$x \langle \mathbf{r} | \hat{p}_y | l, m \rangle - y \langle \mathbf{r} | \hat{p}_x | l, m \rangle = -i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) \langle \mathbf{r} | l, m \rangle \quad (6-3-11)$$

となる。この式は、(6-3-7)の左辺を変形したものだったので、

$$\langle \mathbf{r} | \hat{L}_z | l, m \rangle = -i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) \langle \mathbf{r} | l, m \rangle \quad (6-3-12)$$

となる。これが、(6-3-7)式の右辺と等しいとおくと、「 $\hat{L}_z$ の固有値方程式の座標表示」、

$$\hat{L}_z | l, m \rangle = m\hbar | l, m \rangle \rightarrow -i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) \varphi_{l,m} = m\hbar \varphi_{l,m} \quad (6-3-13)$$

が得られる。ここで、(6-3-5)式を使った。

⁸ 式(6-3-4)の積分は $d\mathbf{r}=dx dy dz$ 、 $|\mathbf{r}\rangle=|x,y,z\rangle$ 、 $\phi(\mathbf{r})=\phi(x,y,z)$ なので、 x, y, z の3重積分となるが、簡略化して書いた。

6-3-3. 極座標で表した固有値方程式

$\hat{L}_z$ の固有値方程式の位置表示が(6-3-13)式の直交座標の形で得られたが、角運動量や次章で取り上げる球対称のポテンシャル問題を取り扱う場合、直交座標より極座標の方が扱いやすい。そこで、次に、(6-3-13)式を極座標での固有値方程式に直すことにする。

直交座標から極座標への演算子の変換については⁹、 $\hat{L}_x$ 、 $\hat{L}_y$ 、 $\hat{L}^2$ も含めて¹⁰以下に結果のみ記す。

$$\hat{L}_x \rightarrow -i\hbar \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) = -i\hbar \left(-\sin\phi \frac{\partial}{\partial\theta} - \cot\theta \cos\phi \frac{\partial}{\partial\phi} \right) \quad (6-3-14)$$

$$\hat{L}_y \rightarrow -i\hbar \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right) = -i\hbar \left(\cos\phi \frac{\partial}{\partial\theta} - \cot\theta \sin\phi \frac{\partial}{\partial\phi} \right) \quad (6-3-15)$$

$$\hat{L}_z \rightarrow -i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial\phi} \quad (6-3-16)$$

$$\hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2 \rightarrow -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} \right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\phi^2} \right] \quad (6-3-17)$$

式(6-3-16)を使うと「極座標表示での $\hat{L}_z$ の固有値方程式」は式(6-3-13)より

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial\phi} \varphi_{l,m} = m\hbar \varphi_{l,m} \quad (6-3-18)$$

となる。

同様に、(6-3-6)式から出発し、(6-3-17)式を使うと、

「極座標表示での $\hat{L}^2$ の固有値方程式」

$$-\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} \right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\phi^2} \right] \varphi_{l,m} = l(l+1)\hbar^2 \varphi_{l,m} \quad (6-3-19)$$

が導ける。

⁹ $x=r\sin\theta\cos\phi$ 、 $y=r\sin\theta\sin\phi$ 、 $z=r\cos\theta$ より変換する。導出については、例えば、前野著「よくわかる量子力学」12章 参照。ここでは本論の流れが妨げられないように省略した。各自、一度は計算してみることをお勧めする。

¹⁰ L_x 、 L_y の微分演算子での表式は、上の6-3-2節の方法か、演習2の(3)の方法で求まる。

6-4. L_z 、 L^2 の固有関数と固有値

結局、量子力学における角運動量の問題は、(6-3-18)と(6-3-19)の偏微分方程式を解いて、その固有関数と固有値を求める問題となった。

6-4-1. L_z の固有関数と固有値

方程式(6-3-18)はすぐに解けるので、最初に L_z の固有関数と固有値を求める。

(6-3-18)を変形して、

$$\frac{\partial \varphi_{lm}}{\partial \phi} = i m \varphi_{lm} \quad (6-4-1)$$

この解は、

$$\varphi_{lm} \propto \psi_m(\phi) \equiv C e^{i m \phi} \quad (6-4-2)$$

となる。ここで $\psi_m(\phi)$ は L_z の固有関数で ϕ のみの関数である。また、 C はその規格化定数である。後でわかるが、(6-3-19)式の解 $\varphi_{l,m}(\theta, \phi)$ は θ と ϕ の関数の積になるが、この ϕ の関数部分が $\psi_m(\phi)$ となる。

ここで、 $\psi_m(\phi)$ は 1 価の関数であることを次の式で要請する。 ($|\psi_m(\phi)|^2$ は、粒子を ϕ と $\phi + d\phi$ の間に見出す確率密度に比例する、と考えると当然の要請¹¹となる。)

$$\psi_m(\phi + 2\pi) = \psi_m(\phi) \quad (6-4-3)$$

式(6-4-2)に(6-4-3)の条件を入れると、 $e^{i(2m)\pi} = 1$ の関係が得られるので、固有値 $m\hbar$ を表す量子数 m の取り得る値は、

$$m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (6-4-4)$$

となる。

L_z の固有値 $m\hbar$ は、こうして「とびとびの値」、 $0, \pm 1\hbar, \pm 2\hbar, \dots$ を持つことがわかった。

(ただし、 m の最大値、最小値については、この段階ではわからないが、 L^2 の固有値方程式を解くと、 $m = -l, -l+1, \dots, 0, \dots, l-1, l$ の $2l+1$ 個の値をとることを次節で示す。)

この結果は、任意の状態で、角運動量 $\mathbf{L}$ の z 軸への射影成分 L_z を測定すれば、

$0, \pm 1\hbar, \pm 2\hbar, \dots$ のとびとびの値しか得られないことを意味する。量子力学的な回転では、その回転軸の方向 (あるいは、 z 軸からの傾き) が とびとびの値しか持てないことになる。これを「方向量子化」と呼ぶ。

¹¹ 多価関数ならば、同じ ϕ に対して複数の確率密度が存在してしまう。

6-4-2. L^2 の固有関数と固有値

偏微分方程式(6-3-19)を解くには、「変数分離法」を使う。

その手順を先に述べる。まず、(6-3-19)の解 $\varphi_{l,m}(\theta, \phi)$ を θ と ϕ の関数の積

$$\varphi_{l,m}(\theta, \phi) = \Theta(\theta)\Phi(\phi) \quad (6-4-5)$$

であると仮定し、(6-4-5)を(6-3-19)に代入する。これにより、偏微分方程式(6-3-19)は $\Theta(\theta)$ と $\Phi(\phi)$ に対する二つの常微分方程式に分離されるので、それぞれの方程式を解き、その解の積が求める固有関数となる。

次に、この手順に従って具体的に進めるが、詳細な計算過程については省略する¹²。

(6-4-5)を(6-3-19)に代入し変形すると、

$$\sin \theta \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d\Theta(\theta)}{d\theta} \right) \frac{1}{\Theta(\theta)} + l(l+1)\sin^2 \theta = - \frac{1}{\Phi(\phi)} \frac{d^2\Phi(\phi)}{d\phi^2} \quad (6-4-6)$$

$$(\theta \text{ のみの関数}) \quad \quad \quad = (\phi \text{ のみの関数})$$

となる。式(6-4-6)の左辺は θ のみの関数であり、右辺は ϕ のみの関数であり、両者が等しくなっている。この式は θ や ϕ がどんな値をとっても成り立つ必要がある（恒等式）ので、それを満たすには両辺は定数でなくてはならない。この定数を m^2 と置くことにする。

すると、

$$\frac{d^2\Phi(\phi)}{d\phi^2} + m^2\Phi(\phi) = 0 \quad (6-4-7)$$

$$\frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d\Theta(\theta)}{d\theta} \right) + \left(l(l+1) - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} \right) \Theta(\theta) = 0 \quad (6-4-8)$$

の二つの常微分方程式が得られる。式(6-4-8)は**ルジャンドル(Legendre)の微分方程式**と呼ばれる。

式(6-4-7)の方はすぐに解ける。その解の一つは L_z の固有関数 (6-4-2)式と同じ形 $Ce^{im\phi}$ なので、これを採用することになると、求める解 $\varphi_{l,m}(\theta, \phi)$ の $\Phi(\phi)$ の部分に L_z の固有関数 $\psi_m(\phi)$ を含むようにできる。（(6-4-3)式と同じ1価である条件 $\Phi_m(\phi + 2\pi) = \Phi_m(\phi)$ を課すと、前節のように $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ が出てくる。）

こうして、

$$\Phi_m(\phi) \equiv \psi_m(\phi) = Ce^{im\phi} \quad (6-4-9)$$

が、量子数 m の時の $\Phi(\phi)$ となる。

¹² 猪木・川合 著「量子力学1」第5章、鈴木他著「演習しよう 量子力学」第8章などを参照。

次に、 $\Theta(\theta)$ を決めるルジャンドルの微分方程式(6-4-8)に移る。この方程式が物理的に許される解を持つ条件は、

$$\begin{cases} l = 0, 1, 2, 3, \dots \\ m = -l, -l+1, \dots, 0, \dots, l-1, l \end{cases} \quad (6-4-10)$$

であることを数学的に示せる¹³。ここで、 m は l に応じて $-l$ から $+l$ まで $2l+1$ 個の値を取れる。また、この時、(6-4-8)の解は、**ルジャンドルの陪多項式**(associated Legendre polynomials) (あるいは**ルジャンドルの陪関数**)、

$$\Theta_{l,m}(\theta) \equiv P_l^m(\cos \theta) \quad (6-4-11)$$

となることを示せる¹⁴。具体的な形は、

$$P_0^0 = 1, P_1^0 = \cos \theta, P_1^1 = \sin \theta, P_2^0 = 1/2(3 \cos^2 \theta - 1), P_2^1 = 1/3(\sin \theta \cos \theta), P_2^2 = 1/3(\sin^2 \theta) \quad (6-4-12)$$

などとなる (注: $P_l^m = P_l^{-m}$)。

結局、 $\mathbf{L}^2$ の固有関数は、規格化定数をまとめて N_l^m として、

$$\begin{aligned} \varphi_{l,m}(\theta, \phi) &\equiv Y_l^m(\theta, \phi) = N_l^m \Theta_{l,m}(\theta) \Phi_m(\phi) \\ &= N_l^m P_l^m(\cos \theta) e^{im\phi} \end{aligned} \quad (6-4-13)$$

$$N_l^m = (-1)^{\frac{m+|m|}{2}} \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}} \quad (6-4-14)$$

と書ける。 $Y_l^m(\theta, \phi)$ を球面調和関数(spherical harmonics)と呼び、次の規格直交関係を満たす。

$$\int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi Y_l^{*m}(\theta, \phi) Y_{l'}^{m'}(\theta, \phi) \sin \theta d\theta = \delta_{ll'} \delta_{mm'} \quad (6-4-15)$$

球面調和関数 $Y_l^m(\theta, \phi)$ は $\mathbf{L}^2$ の固有関数であるが、 $\mathbf{L}_z$ の固有関数も ϕ 部分として含むので、 $\mathbf{L}^2$ と $\mathbf{L}_z$ の同時固有関数になっていることがわかる。

その際の固有値は、(6-4-10)式の量子数 l, m から決まる。この式より、 $\mathbf{L}^2$ の固有値 $l(l+1)\hbar^2$ を決める量子数 l は、 $l = 0, 1, 2, 3, \dots$ からとびとびの正の整数値を持つことがわかる。

¹³ (6-4-8)で l が非負の整数である場合を「ルジャンドルの陪微分方程式」といい、 Θ はその解、**ルジャンドルの陪関数(多項式)** となる。ここで、「陪(ばい)」とは「伴(とも)をする」、「補佐する」などという意味である。本講義では省略。猪木・川合 著「量子力学1」第5章、鈴木他著「演習しよう 量子力学」第8章などを参照。なお、代数的に固有値方程式を解く場合は直接的にこの関係が出てくる。ただし、この場合、 l は半整数でも良いことがわかる。その時 m は、0 を取らない (演習13-9 参照)。

¹⁴ 脚注12の参考書などを参照。

それと同時に、 $\mathbf{L}_z$ の固有値 $m\hbar$ を決める量子数 m も、それぞれの l の値に対して、
 $m = -l, -l+1, \dots, 0, \dots, l-1, l$ と「 $2l+1$ 個」に制限されることがわかる。

すなわち、	$l = 0$	$m = 0$	
	$l = 1$	$m = -1, 0, 1$	
	$l = 2$	$m = -2, -1, 0, 1, 2$	(6-4-15)
	$l = 3$	$m = -3, -2, -1, 0, 1, 2, 3$	
	$\dots$	$\dots$	

こうして、量子力学的な回転では、その回転の程度である角運動量の大きさも、その回転軸が向ける方向の数もとびとびの値しか持てない¹⁵。また、向ける回転軸の方向の数は角運動量が大きくなるほど増えてゆく。

6-4-3. 球面調和関数 $Y_l^m(\theta, \phi)$

($\mathbf{L}^2$ と $\mathbf{L}_z$ の同時固有関数)

$\mathbf{L}^2$ と $\mathbf{L}_z$ の同時固有関数である球面調和関数 $Y_l^m(\theta, \phi)$

の具体的な形を $l = 0, 1, 2$ に対して示す。

・ $Y_0^0(\theta, \phi)$ ($l = 0, m = 0$)

$$Y_0^0(\theta, \phi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \quad (6-4-16)$$

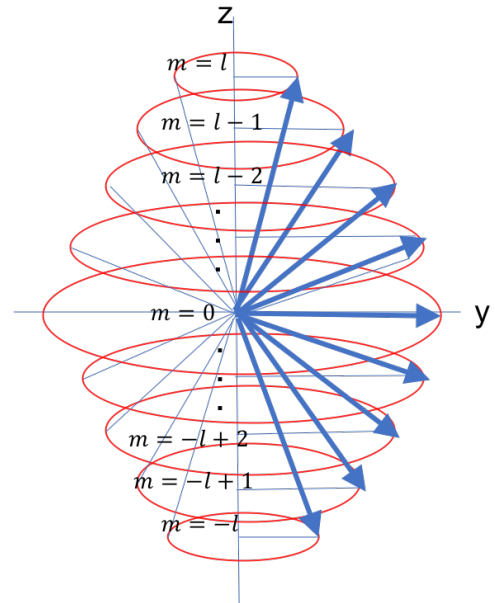
・ $Y_1^m(\theta, \phi)$ ($l = 1, m = -1, 0, +1$)

$$\begin{cases} Y_1^{-1}(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{-i\phi} \\ Y_1^0(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta \\ Y_1^1(\theta, \phi) = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{i\phi} \end{cases} \quad (6-4-17)$$

・ $Y_2^m(\theta, \phi)$ ($l = 2, m = -2, -1, 0, +1, +2$)

$$\begin{cases} Y_2^{\pm 2}(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2 \theta e^{\pm 2i\phi} \\ Y_2^{\pm 1}(\theta, \phi) = \mp \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin \theta \cos \theta e^{\pm i\phi} \\ Y_2^0(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{5}{4\pi}} \left(\frac{3}{2} \cos^2 \theta - \frac{1}{2} \right) \end{cases} \quad (6-4-18)$$

$|Y_l^m(\theta, \phi)|^2$ は ϕ に無関係になる ($|e^{im\phi}|^2 = 1$) ので、 $|Y_l^m(\theta, \phi)|^2$ は、その粒子の軌道角運動量が $|l, m\rangle$ の状態の時、粒子が θ と $\theta + d\theta$ の間に見出される確率密度に比例する。



¹⁵ スピン角運動量 S の場合、 S は $1/2$ などの半整数もとれる。この場合も z 成分は S に応じて $-S$ から $+S$ までの $2S+1$ 個の値を持てる (演習13-9)。電子スピンの場合は $S=1/2$ なので S の z 成分は $+1/2$ と $-1/2$ の二つしかない。これまで、この状態を $|u\rangle, |d\rangle$ としてきた。

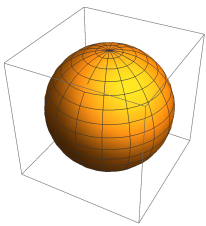
これを図示する方法はいくつかあるが、ここでは、 $|Y_l^m(\theta, \phi)|^2$ の大きさを原点からの距離で表す方法で説明する。具体的には、例えば、まず、z-x 平面内などで $|Y_l^m(\theta, \phi)|^2$ を描き、それをz軸の周りに回転させればよい。(ϕ に無関係なので、z軸に回転対称となっている。)

下の図の原点からの距離は「粒子がいる距離」ではなく「その角度の方向に粒子のいる確率密度の大きさ」になるように書かれている。

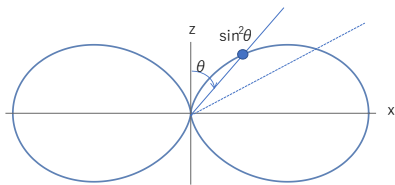
• Mathematicaによる描画例 (すぐ下のプログラムコードは $|Y_1^m(\theta, \phi)|^2$ の場合)

```
Table[SphericalPlot3D[
Abs[SphericalHarmonicY[1, m, theta, phi]]^2, {theta, 0, Pi}, {phi, 0, 2 Pi}, Axes -> False], {m, -1, 1}]
```

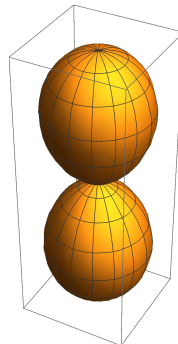
$$|Y_0^0(\theta, \phi)|^2$$



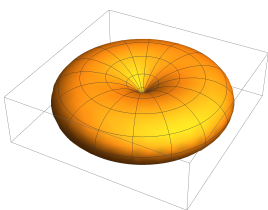
$$|Y_1^{\pm 1}(\theta, \phi)|^2$$



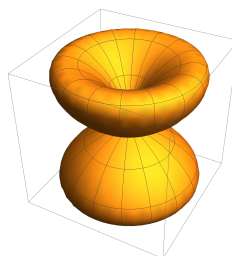
$$|Y_1^0(\theta, \phi)|^2$$



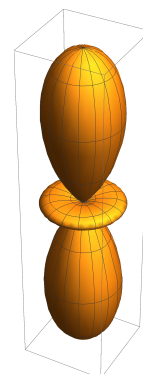
$$|Y_2^{\pm 2}(\theta, \phi)|^2$$



$$|Y_2^{\pm 1}(\theta, \phi)|^2$$



$$|Y_2^0(\theta, \phi)|^2$$



演習13

1. $\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z$ がエルミート演算子であることを示せ
2. $[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar\hat{L}_z$, $[\hat{L}_y, \hat{L}_z] = i\hbar\hat{L}_x$, $[\hat{L}_z, \hat{L}_x] = i\hbar\hat{L}_y$ を証明せよ
3. $[\hat{L}^2, \hat{L}_x] = 0$, $[\hat{L}^2, \hat{L}_y] = 0$, $[\hat{L}^2, \hat{L}_z] = 0$ を証明せよ
4. 昇降演算子を次のように定義する。

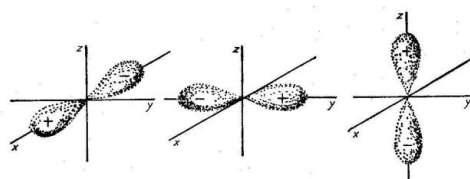
$$\hat{L}_+ \equiv \hat{L}_x + i\hat{L}_y \quad (\text{上昇演算子})、\quad \hat{L}_- \equiv \hat{L}_x - i\hat{L}_y \quad (\text{下降演算子})$$

この時、 $[\hat{L}_+, \hat{L}_-] = 2\hbar\hat{L}_z$ 、 $[\hat{L}_z, \hat{L}_\pm] = \pm\hbar\hat{L}_\pm$ 、 $[\hat{L}^2, \hat{L}_\pm] = 0$ となることを示せ。

5. Y_l^0, Y_l^1 が規格化条件を満たしていることを(6-4-15)式を計算して確かめよ。
6. $|Y_l^m(\theta, \phi)|^2$ ($l=1, m=-1, 0, +1$) の z - x 平面での図を書き、それを z 軸の周りに回転すると、6-4-3節の $|Y_l^m(\theta, \phi)|^2$ の3次元図のようになることを説明せよ。
また、この図と古典力学との関連に関して述べなさい。
7. 球面調和関数 $Y_l^m(\theta, \phi)$ の次のような1次結合がそれぞれ y, z, x で書ける（最右辺の式になる）ことを示せ。

$$\begin{cases} K_1^{-1} = \frac{i}{\sqrt{2}}(Y_1^1 + Y_1^{-1}) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}y \\ K_1^0 = Y_1^0 = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}z \\ K_1^1 = \frac{1}{\sqrt{2}}(-Y_1^1 + Y_1^{-1}) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}x \end{cases}$$

(参考) $l=1$ に属する3つの解、 Y_1^{-1}, Y_1^0, Y_1^1 の線形結合により K_1^{-1}, K_1^0, K_1^1 を作っても、これらは、やはり $l=1$ に属する3つの解になっている。 K_1^{-1}, K_1^0, K_1^1 は「立方調和関数」と呼ばれることがある。下図に $|K_1^{-1}|^2, |K_1^{-1}|^2, |K_1^0|^2$ を示す。 $K_1^0 = Y_1^0$ なので、 $|K_1^0|^2 = |Y_1^0|^2$ となっている。



8. $l=l, m=l$ の状態 $|l, l\rangle$ での期待値 $\langle \hat{L}_x \rangle$ 、 $\langle \hat{L}_y \rangle$ 、 $\langle \hat{L}_x^2 \rangle$ 、 $\langle \hat{L}_y^2 \rangle$ を求めよ。

($\hat{L}_x, \hat{L}_y$ を問題4で定義された $\hat{L}_+, \hat{L}_-$ で表し、問題9で証明する関係式¹⁶⁾)

$$\hat{L}_+ |l, m\rangle = c_+ |l, m+1\rangle, \quad \hat{L}_- |l, m\rangle = c_- |l, m-1\rangle$$

$$\hat{L}_\mp \hat{L}_\pm = \hat{L}^2 - \hat{L}_z(\hat{L}_z \pm \hbar), \quad \hat{L}^2 - \hat{L}_z^2 = \frac{1}{2}(\hat{L}_+ \hat{L}_- + \hat{L}_- \hat{L}_+)$$

を使え。

また、この結果より、不確定性関係(3-6-6)式の等号を満たす場合になっている事を示せ。

¹⁶⁾ この式は次の演習13-9で示す。

9. (自習問題) 角運動量 (記号は L だが、軌道角運動量であるとの制限はつけないことにする) の固有状態と固有値に関して 交換関係から出発し代数的に調べる。¹⁷

(1) 以下の関係を示しなさい。

$$\hat{L}_{\pm}\hat{L}_{\pm} = \hat{L}^2 - \hat{L}_z(\hat{L}_z \pm \hbar), \quad \hat{L}^2 - \hat{L}_z^2 = \frac{1}{2}(\hat{L}_+\hat{L}_- + \hat{L}_-\hat{L}_+)$$

(2) $\hat{L}^2$ と $\hat{L}_z$ は交換するから、両者の同時固有状態 $|\lambda, \mu\rangle$ が存在する。すなわち、

$$\hat{L}^2|\lambda, \mu\rangle = \lambda|\lambda, \mu\rangle, \quad \hat{L}_z|\lambda, \mu\rangle = \mu|\lambda, \mu\rangle$$

固有値 λ, μ の間には $\lambda \geq \mu^2$ の関係が成り立つことを示せ。

(3) $\hat{L}_+|\lambda, \mu\rangle$ 、 $\hat{L}_-|\lambda, \mu\rangle$ は $\hat{L}^2$ と $\hat{L}_z$ の同時固有状態、すなわち、 $c_{\pm}$ を係数として、

$\hat{L}_{\pm}|\lambda, \mu\rangle = c_{\pm}|\lambda, \mu \pm \hbar\rangle$ であることを示し、 $\hat{L}^2$ と $\hat{L}_z$ の固有値は、それぞれ、 λ 、 $\mu \pm \hbar$ である事を示せ。

(4) $\hat{L}_+|\lambda, \mu_{max}\rangle = 0$ 、 $\hat{L}_-|\lambda, \mu_{min}\rangle = 0$ なる状態があることを示せ。

(5) $\mu_{max} = l\hbar$ とおくと $\lambda = l(l+1)\hbar^2$ 、 $\mu_{min} = -l\hbar$ 、 $\mu/\hbar = -l, -l+1, \dots, l-1, l$ となることを示せ。したがって l は整数、または、半整数となる。

¹⁷ 小出他「量子力学演習 (基礎物理学選書17)」 (裳華房)