量子力学での演算子の扱い方

角運動量・スピンの展開

2022.8.23

鹿児島現代物理勉強会

御領　悟志

基本的な考え方

- 波動関数に微分演算子を作用させて固有値を求めることで観測値が求まることになる。
- 物理量を微分演算子の形で書き下すことができればシュレディンガー方程式に書き下すことで解を求めることが可能である。
- しかし、後に議論する一般的な角運動量と同じ規則性を持つスピンは、微分演算子で表現することができず、これから扱う行列表現でしか扱うことができない。
- 従って、演算子の行列表現に習熟することが不可欠となる。

演算子の固有値と固有関数

演算子 Q に対して固有関数を作用させその解を求める固有方程式は、次の通りになる。

$$Q\varphi_q = q\varphi_q \quad \cdots ①$$

q：固有値

φ_q：固有値に属する固有関数

線形演算子は

$$\begin{cases} Q(\varphi_1 + \varphi_2) = Q\varphi_1 + Q\varphi_2 \\ Q(c\varphi) = c(Q\varphi) \end{cases}$$

エルミート演算子とその性質

$$(\phi, \mathrm{Q}\varphi) = \int \phi^* \mathrm{Q}\varphi d\vec{r} \quad \cdots ①$$ と定義する。

次の②の関係を満たす演算子Qをエルミート演算子という。

$$(\varphi, \mathrm{Q}\phi)^* = (\phi, \mathrm{Q}\varphi) \quad \cdots ②$$

$$(\varphi, \mathrm{Q}\phi)^* = \left(\int \varphi^* \mathrm{Q}\phi d\vec{r}\right)^* = \int (\mathrm{Q}\phi)^* \varphi d\vec{r} \quad \cdots ③$$

$$(\varphi, \mathrm{Q}\phi)^* = (\mathrm{Q}\phi, \varphi) \quad \cdots ④$$

②と④式からエルミート演算子は次の関係を満たす。

$$(\phi, \mathrm{Q}\varphi) = (\mathrm{Q}\phi, \varphi) \quad \cdots ⑤$$

$$\mathrm{Q}\varphi = q\varphi \quad \cdots ⑥$$

$$(\varphi, \mathrm{Q}\varphi)^* = (\varphi, \mathrm{Q}\varphi) \quad \cdots ⑦$$

$$(\varphi, q\varphi)^* = (\varphi, q\varphi) \quad \cdots ⑧$$

$$q^* = q \quad \cdots ⑨$$

エルミート演算子Qの固有値qは、実数である。

観測される物理量の演算子は、エルミート演算子である。

運動量演算子はエルミート演算子

$$\vec{p} = \left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x} \quad -i\hbar\frac{\partial}{\partial y} \quad -i\hbar\frac{\partial}{\partial z} \right) \quad \cdots ①$$

運動量演算子のエルミート性を確認する。

$$\left(\phi, -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\varphi \right) = \iiint \phi^* \left(-i\hbar\frac{\partial \varphi}{\partial x} \right) dxdydz \quad \cdots ②$$

$$= \iint \left[\phi^* (-i\hbar\varphi) \right]_{-\infty}^{\infty} dydz - \iiint \frac{\partial \phi^*}{\partial x}(-i\hbar\varphi) dxdydz \quad \cdots ③$$

$$= -i\hbar \iint \left[\phi^* \varphi \right]_{-\infty}^{\infty} dydz + i\hbar \iiint \frac{\partial \phi^*}{\partial x}\varphi dxdydz \quad \cdots ④$$

$x = \infty \quad x = -\infty$ のとき $\phi^* = 0 \quad \varphi = 0$ なので

$$= i\hbar \iiint \frac{\partial \phi^*}{\partial x}\varphi dxdydz \quad \cdots ⑤$$

$$= \iiint \left(-i\hbar\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)^* \varphi dxdydz \quad \cdots ⑥$$

$$= \left(\iiint \varphi^* \left(-i\hbar\frac{\partial \phi}{\partial x} \right) dxdydz \right)^* \quad \cdots ⑦$$

$$\left(\phi, -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\varphi \right) = \left(\varphi, -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\phi \right)^* \cdots ⑧$$

$(\phi, \mathbf{Q}\varphi) = (\varphi, \mathbf{Q}\phi)^*$ の関係を満たす。

$\mathbf{Q} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$ はエルミート演算子である。

エルミート演算子の固有関数の直交性

$$\left.\begin{aligned} Q\varphi_1 &= q_1\varphi_1 \\ Q\varphi_2 &= q_2\varphi_2 \end{aligned}\right\}$$ …⓪ とおくと①②となる。

$$(\varphi_1, Q\varphi_2) = q_2(\varphi_1, \varphi_2) \quad \cdots ①$$

$$(\varphi_2, Q\varphi_1) = q_1(\varphi_2, \varphi_1) \quad \cdots ②$$

Q はエルミート演算子なので

$$(\varphi_2, Q\varphi_1) = (\varphi_1, Q\varphi_2)^* \quad \cdots ③$$

①の複素共役をとると

$$(\varphi_1, Q\varphi_2)^* = q_2^*(\varphi_1, \varphi_2)^* = q_2^*(\varphi_2, \varphi_1) \cdots ④$$

エルミート演算子なので、前シートでの結果より

$$q_2^* = q_2 \quad \cdots ⑤$$

②③より

$$(\varphi_2, Q\varphi_1) = q_1(\varphi_2, \varphi_1) = q_2^*(\varphi_2, \varphi_1)$$

$$(\varphi_2, Q\varphi_1) = q_2(\varphi_2, \varphi_1) \quad \cdots ⑥$$

②と⑥より $q_1(\varphi_2, \varphi_1) = q_2(\varphi_2, \varphi_1)$

$$(q_1 - q_2)(\varphi_2, \varphi_1) = 0 \quad \cdots ⑦$$

$\therefore \quad q_1 \neq q_2$ ならば $(\varphi_2, \varphi_1) = 0$

異なる固有値の固有関数は直交する。

Gram・Schmitの正規直交化法(1)

$\varphi_1 = c_1\phi_1$ …① とおくと

ϕ_1 は正規直交関数なので規格化される。

$$(\varphi_1,\varphi_1) = c_1^{*}c_1(\phi_1,\phi_1) \quad \cdots②$$

$$(\phi_1,\phi_1) = 1$$

$$c_1^{*}c_1 = |c_1|^2 = (\varphi_1,\varphi_1)$$

$$|c_1| = \sqrt{(\varphi_1,\varphi_1)} \quad \cdots③$$

$$\phi_1 = \frac{\varphi_1}{c_1} = \frac{\varphi_1}{\sqrt{(\varphi_1,\varphi_1)}} = \frac{\varphi_1}{|\varphi_1|}$$

次に $\varphi_2 - a_1\phi_1$ と ϕ_1 が直交すると …④

$$(\varphi_2 - a_1\phi_1,\phi_1) = (\varphi_2,\phi_1) - a_1(\phi_1,\phi_1) = 0$$

$$(\varphi_2,\phi_1) - a_1 = 0 \quad a_1 = (\varphi_2,\phi_1) \quad \cdots⑤$$

$$\phi_2 = c_2(\varphi_2 - (\varphi_2,\phi_1)\phi_1) \quad \cdots⑥$$

規格化すると $(\phi_2,\phi_2) = 1$ なので

$$(c_2(\varphi_2 - (\varphi_2,\phi_1)\phi_1), c_2(\varphi_2 - (\varphi_2,\phi_1)\phi_1)) = 1 \quad \cdots⑦$$

$$|c_2|^2|\varphi_2 - (\varphi_2,\phi_1)\phi_1|^2 = 1 \quad |c_2| = \frac{1}{|\varphi_2 - (\varphi_2,\phi_1)\phi_1|}$$

$$\phi_2 = \frac{(\varphi_2 - (\varphi_2,\phi_1)\phi_1)}{|\varphi_2 - (\varphi_2,\phi_1)\phi_1|} \quad \cdots⑧$$

Gram・Schmitの正規直交化法（2）

次に $\varphi_3 - a_1\phi_1 - a_2\phi_2$ と ϕ_1 ϕ_2 が直交すると

$$\left(\varphi_3 - a_1\phi_1 - a_2\phi_2, \phi_1\right) = \left(\varphi_3, \phi_1\right) - a_1\left(\phi_1, \phi_1\right) - a_2\left(\phi_2, \phi_1\right) = 0 \quad \cdots ⑨$$

$$\left(\varphi_3, \phi_1\right) - a_1 = 0 \quad a_1 = \left(\varphi_3, \phi_1\right) \quad \cdots ⑩$$

$$\left(\varphi_3 - a_1\phi_1 - a_2\phi_2, \phi_2\right) = \left(\varphi_3, \phi_2\right) - a_1\left(\phi_1, \phi_2\right) - a_2\left(\phi_2, \phi_2\right) = 0 \quad \cdots ⑪$$

$$\left(\varphi_3, \phi_2\right) - a_2 = 0 \quad a_2 = \left(\varphi_3, \phi_2\right) \qquad \phi_3 = c_3\left(\varphi_3 - \left(\varphi_3, \phi_1\right)\phi_1 - \left(\varphi_3, \phi_2\right)\phi_2\right) \quad \cdots ⑫$$

$$\left(\phi_3, \phi_3\right) = \left(c_3\left(\varphi_3 - \left(\varphi_3, \phi_1\right)\phi_1 - \left(\varphi_3, \phi_2\right)\phi_2\right), c_3\left(\varphi_3 - \left(\varphi_3, \phi_1\right)\phi_1 - \left(\varphi_3, \phi_2\right)\phi_2\right)\right) = 1 \quad \cdots ⑬$$

$$\left|c_3\right|^2 \left|\varphi_3 - \left(\varphi_3, \phi_1\right)\phi_1 - \left(\varphi_3, \phi_2\right)\phi_2\right|^2 = 1 \qquad \left|c_3\right| = \frac{1}{\left|\varphi_3 - \left(\varphi_3, \phi_1\right)\phi_1 - \left(\varphi_3, \phi_2\right)\phi_2\right|} \quad \cdots ⑭$$

$$\phi_3 = \frac{\left(\varphi_3 - \left(\varphi_3, \phi_1\right)\phi_1 - \left(\varphi_3, \phi_2\right)\phi_2\right)}{\left|\varphi_3 - \left(\varphi_3, \phi_1\right)\phi_1 - \left(\varphi_3, \phi_2\right)\phi_2\right|} \quad \cdots ⑮$$

Gram・Schmitの正規直交化法(3)

$$\Phi_k = \left(\varphi_k - \sum_{i=1}^{k-1} a_i \phi_i \right)$$ とおく。

$1 \le l \le k-1$ について

Φ_k が全ての関数 ϕ_l に直交するならば

$$(\Phi_k, \phi_l) = \left(\left\{ \varphi_k - \sum_{i=1}^{k-1} a_i \phi_i \right\}, \phi_l \right) = 0$$

$$0 = (\varphi_k, \phi_l) - \sum_{i=1}^{k-1} a_i (\phi_i, \phi_l)$$

$$0 = (\varphi_k, \phi_l) - a_l (\phi_l, \phi_l)$$

$$0 = (\varphi_k, \phi_l) - a_l$$

$a_l = (\varphi_k, \phi_l)$ なので $a_i = (\varphi_k, \phi_i)$

$$\Phi_k = \left(\varphi_k - \sum_{i=1}^{k-1} (\varphi_k, \phi_i) \phi_i \right)$$ とかける。

$$\phi_k = \frac{\Phi_k}{|\Phi_k|}$$

とするとk個の正規直交関数系と予想される。

Gram・Schmitの正規直交化法(4)

一般化すると

$$\phi_k = \frac{\left(\varphi_k - \sum_{i=1}^{k-1} (\phi_i, \varphi_k)\phi_i\right)}{\left|\varphi_k - \sum_{i=1}^{k-1} (\phi_i, \varphi_k)\phi_i\right|} \quad \cdots ⑯$$

Gram・Schmitの正規直交化法(5)

$$\Phi_k = \left(\varphi_k - \sum_{i=1}^{k-1} (\phi_i, \varphi_k) \phi_i \right)$$ とおくと

$$(\Phi_k, \phi_l) = \left(\left\{ \varphi_k - \sum_{i=1}^{k-1} (\phi_i, \varphi_k) \phi_i \right\}, \phi_l \right)$$

$$(\Phi_k, \phi_l) = (\varphi_k, \phi_l) - \sum_{i=1}^{k-1} (\phi_i, \varphi_k)(\phi_i, \phi_l)$$

ϕ_i は、1からk-1まで全てお互いに正規直交関数なので

$$(\Phi_k, \phi_l) = (\varphi_k, \phi_l) - \sum_{i=1}^{k-1} (\phi_i, \varphi_k) \delta_{il}$$

$1 \le l \le k-1$ のとき

$$(\Phi_k, \phi_l) = (\varphi_k, \phi_l) - (\phi_l, \varphi_k) \delta_{ll}$$

$$(\Phi_k, \phi_l) = (\varphi_k, \phi_l) - (\phi_l, \varphi_k) = 0 \quad \cdots ⑰$$

Φ_k は ϕ_1 ~ ϕ_{k-1} までの全ての基底関数に垂直で

$$\phi_k = \frac{\Phi_k}{|\Phi_k|}$$

とするとk個の全ての関数はお互い直交することを示す。

N個の一次独立な関数から

$$(\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3, , \varphi_N)$$

→

N個のお互いに直交する関数を求められる

$$(\phi_1, \phi_2, \phi_3, , \phi_N)$$

演算子の行列表現（1）

ある線形演算子 $\hat{Q}$ によって関数 $f(\vec{r}) \Rightarrow g(\vec{r})$ に変換されるとする。

$$g(\vec{r}) = \hat{Q} f(\vec{r}) \quad \cdot\cdot ①$$

規格化完全系 $\{u_n(\vec{r})\}$ を基底ベクトルとして展開する。

$$f(\vec{r}) = \sum_{m=1}^{n} \mathrm{c_m}(\mathrm{t}) u_m(\vec{r}) \quad \cdot\cdot ②$$

$$g(\vec{r}) = \sum_{n=1}^{n} \mathrm{d_n}(\mathrm{t}) u_n(\vec{r}) \quad \cdot\cdot ③$$

展開係数を求めると

$$\mathrm{d_n}(\mathrm{t}) = \int u_n^*(\vec{r}) g(\vec{r}) d\vec{r} = \int u_n^*(\vec{r}) \hat{Q} f(\vec{r}) d\vec{r} \quad \cdot\cdot ④$$

$$\mathrm{d_n}(\mathrm{t}) = \int u_n^*(\vec{r}) \hat{Q} \left(\sum_{m=1}^{n} \mathrm{c_m}(\mathrm{t}) u_m(\vec{r}) \right) d\vec{r}$$

$$\mathrm{d_n}(\mathrm{t}) = \sum_{m=1}^{n} \mathrm{c_m}(\mathrm{t}) \left[\int u_n^*(\vec{r}) \hat{Q} u_m(\vec{r}) d\vec{r} \right]$$

$$\mathrm{d_n}(\mathrm{t}) = \sum_{m=1}^{n} \left[\int u_n^*(\vec{r}) \hat{Q} u_m(\vec{r}) d\vec{r} \right] \mathrm{c_m}(\mathrm{t}) \quad \cdot\cdot ⑤$$

$$Q_{nm} = \int u_n^*(\vec{r}) \hat{Q} u_m(\vec{r}) d\vec{r}$$ とおけば

$$\mathrm{d_n}(\mathrm{t}) = \sum_{m=1}^{n} Q_{nm} \mathrm{c_m}(\mathrm{t}) \quad \cdot\cdot ⑥$$

演算子の行列表現(2)

$$\begin{bmatrix} d_1(t) \\ d_2(t) \\ d_3(t) \\ d_n(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} Q_{11} & Q_{12} & & Q_{1n} \\ Q_{21} & Q_{22} & & Q_{2n} \\ & & & \\ Q_{n1} & Q_{n2} & & Q_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_1(t) \\ c_2(t) \\ c_3(t) \\ c_n(t) \end{bmatrix} \quad \cdot\cdot ⑦$$

$\hat{Q}$ は、エルミート演算子なので

$$\left(g, \hat{Q} f \right) = \left(f, \hat{Q} g \right)^* \quad \cdot\cdot ⑧$$

$$\left(u_n(\vec{r}), \hat{Q} u_m(\vec{r}) \right) = \left(u_m(\vec{r}), \hat{Q} u_n(\vec{r}) \right)^* \quad \cdot\cdot ⑨$$

$$Q_{nm} = Q_{mn}^* \quad \cdot\cdot ⑩$$

エルミート演算子ならば全ての行列要素は、
上記関係を満たす。

エルミート演算子の行列表現

$\Downarrow$

エルミート行列

演算子の行列表現（3）

2つの演算子 $\hat{P}$ $\hat{Q}$ の積演算子 $\hat{P}\hat{Q}$

$$f \Rightarrow \hat{Q} \Rightarrow g \Rightarrow \hat{P} \Rightarrow h$$

$$g(\vec{r}) = \hat{Q} f(\vec{r}) \quad \cdot\cdot ⑪$$

$$h(\vec{r}) = \hat{P} g(\vec{r}) \quad \cdot\cdot ⑫$$

$$f(\vec{r}) = \sum_{m=1}^{n} \mathrm{a}_{\mathrm{m}}(\mathrm{t}) u_m(\vec{r}) \quad \cdot\cdot ⑬$$

$$g(\vec{r}) = \sum_{m=1}^{n} \mathrm{b}_{\mathrm{m}}(\mathrm{t}) u_m(\vec{r})$$

$$h(\vec{r}) = \sum_{m=1}^{n} \mathrm{c}_{\mathrm{m}}(\mathrm{t}) u_m(\vec{r})$$

$$\mathrm{b}_{\mathrm{l}}(\mathrm{t}) = \sum_{m=1}^{n} Q_{lm} \mathrm{a}_{\mathrm{m}}(\mathrm{t}) \quad \cdot\cdot ⑭$$

$$\mathrm{c}_{\mathrm{n}}(\mathrm{t}) = \sum_{l=1}^{n} P_{nl} \mathrm{b}_{\mathrm{l}}(\mathrm{t}) \quad \cdot\cdot ⑮$$

$$\mathrm{c}_{\mathrm{n}}(\mathrm{t}) = \sum_{l=1}^{n} P_{nl} \sum_{m=1}^{n} Q_{lm} \mathrm{a}_{\mathrm{m}}(\mathrm{t}) \cdot ⑯$$

$$\mathrm{c}_{\mathrm{n}}(\mathrm{t}) = \sum_{l=1}^{n} \sum_{m=1}^{n} P_{nl} Q_{lm} \mathrm{a}_{\mathrm{m}}(\mathrm{t}) \cdot\cdot ⑰$$

$$\mathrm{c}_{\mathrm{n}}(\mathrm{t}) = \sum_{m=1}^{n} \left(\sum_{l=1}^{n} P_{nl} Q_{lm} \right) \mathrm{a}_{\mathrm{m}}(\mathrm{t}) \quad \cdot\cdot ⑱$$

$$\left[\hat{P}\hat{Q} \right]_{nm} = \sum_{l=1}^{n} P_{nl} Q_{lm} \quad \cdot\cdot ⑲$$

演算子の行列表現（4）

積演算子の行列表現は各々の演算子の行列表現の積に等しい。

$$Q_{lm} = \left(u_l(\vec{r}), \hat{Q} u_m(\vec{r}) \right)$$

$$P_{nl} = \left(u_n(\vec{r}), \hat{P} u_l(\vec{r}) \right)$$

$$\left[\hat{P}\hat{Q} \right]_{nm} = \sum_{l=1}^{n} P_{nl} Q_{lm} \qquad \cdots ⑲$$

$$\begin{bmatrix} c_1(t) \\ c_2(t) \\ c_3(t) \\ c_n(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} P_{11} & P_{12} & P_{1n} \\ P_{21} & P_{22} & P_{2n} \\ & & \\ P_{n1} & P_{n2} & P_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} Q_{11} & Q_{12} & Q_{1n} \\ Q_{21} & Q_{22} & Q_{2n} \\ & & \\ Q_{n1} & Q_{n2} & Q_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_1(t) \\ a_2(t) \\ a_3(t) \\ a_n(t) \end{bmatrix} \qquad \cdots ⑳$$

量子力学の行列表示(1)

$\Psi(\vec{r},t)$ は、力学系の状態を表す。$\Longrightarrow$ 状態ベクトル ‥①

ケット(ket)　　$\Psi(\vec{r},t)=\left|\Psi\right\rangle$

ブラ(bra)　　$\Psi^*(\vec{r},t)=\left\langle\Psi\right|$

基底ベクトルを決める $\Longrightarrow$ 表示を決める ‥②

規格化完全系 $\left\{u_n(\vec{r})\right\}$ を基底ベクトルとする。

$$\Psi(\vec{r},t)=\sum_{n=1}^{n}\mathrm{c}_{\mathrm{n}}(\mathrm{t})u_n(\vec{r}) \quad ‥③$$

$$\Psi(\vec{r},t)=\left|\Psi\right\rangle=\begin{bmatrix} c_1(t) \\ c_2(t) \\ c_3(t) \\ c_n(t) \end{bmatrix} \quad ‥④$$

$$\left(\phi,\hat{Q}\,\varphi\right)=\int\phi^*\,\hat{Q}\,\varphi d\vec{r}=\left\langle\phi\middle|\hat{Q}\middle|\varphi\right\rangle$$

特に　ϕ　φ　が基底ベクトルの時

$$\left\langle n\middle|\hat{Q}\middle|m\right\rangle=\int u_n(\vec{r})^*\,\hat{Q}\,u_m(\vec{r})d\vec{r}=Q_{nm} \quad ‥⑤$$

量子力学の行列表示(２)

$$\hat{Q} = Q_{nm} = \begin{bmatrix} Q_{11} & Q_{12} & & Q_{1n} \\ Q_{21} & Q_{22} & & Q_{2n} \\ & & & \\ Q_{n1} & Q_{n2} & & Q_{nn} \end{bmatrix} \cdots ⑥$$

$$\Phi(\vec{r}, t) = \sum_{n=1}^{n} \mathrm{d}_{\mathrm{n}}(\mathrm{t}) u_n(\vec{r}) \cdots ⑦$$

$$\langle \Phi | = \left[d^*{}_1(t) \quad d^*{}_2(t) \qquad d^*{}_n(t) \right] \cdots ⑧$$

$$\langle \Phi | \hat{Q} | \Psi \rangle = \left[d^*{}_1(t) \quad d^*{}_2(t) \qquad d^*{}_n(t) \right] \begin{bmatrix} Q_{11} & Q_{12} & & Q_{1n} \\ Q_{21} & Q_{22} & & Q_{2n} \\ & & & \\ Q_{n1} & Q_{n2} & & Q_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_1(t) \\ c_2(t) \\ c_3(t) \\ c_n(t) \end{bmatrix} \cdots ⑨$$

量子力学の行列表示(3)

$$\left|\Psi(t)\right\rangle = \sum_{n=1}^{n} \mathbf{c_n(t)}\left|n\right\rangle \quad \mathbf{c_n(t)} = \left\langle n\middle|\Psi(t)\right\rangle \quad \cdot\cdot①$$

ただし $\left\{\left|n\right\rangle\right\}$ は規格直交系である。

$$\hat{\mathrm{H}}\left|n\right\rangle = E_n\left|n\right\rangle \qquad \left\langle n\middle|m\right\rangle = \delta_{nm} \quad \cdot\cdot②$$

シュレディンガー方程式

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\left|\Psi(t)\right\rangle = \hat{\mathrm{H}}\left|\Psi(t)\right\rangle$$ に代入する。

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\left(\sum_{n=1}^{n}\mathrm{c_n(t)}\left|n\right\rangle\right) = \hat{\mathrm{H}}\left(\sum_{n=1}^{n}\mathrm{c_n(t)}\left|n\right\rangle\right) \quad \cdot\cdot③$$

$$i\hbar\sum_{n=1}^{n}\frac{\partial \mathrm{c_n(t)}}{\partial t}\left|n\right\rangle = \sum_{n=1}^{n}\mathrm{c_n(t)}\,\hat{\mathrm{H}}\left|n\right\rangle$$

$$i\hbar\sum_{n=1}^{n}\frac{\partial \mathbf{c_n(t)}}{\partial t}\left|n\right\rangle = \sum_{n=1}^{n}\mathbf{c_n(t)}E_n\left|n\right\rangle$$

$$i\hbar\frac{\partial \mathrm{c_n(t)}}{\partial t} = \mathrm{c_n(t)}E_n$$

$$\frac{1}{\mathrm{c_n(t)}}\frac{\partial \mathrm{c_n(t)}}{\partial t} = \frac{E_n}{i\hbar} = -i\frac{E_n}{\hbar}$$

$$\ln \mathrm{c_n(t)} = -i\frac{E_n}{\hbar}t + c$$

$$\mathrm{c_n(t)} = e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t+c} = e^c e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t} = c_n(0)e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t} \quad \cdot\cdot④$$

量子力学の行列表示(４)

$$\mathrm{c_n(t)} = c_n(0)e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t} \quad \cdot\cdot④$$

$$\left|\Psi(t)\right\rangle = \sum_{n=1}^{n} \mathrm{c_n(t)}\left|n\right\rangle = \sum_{n=1}^{n} c_n(0)e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t}\left|n\right\rangle \quad \cdot\cdot⑤$$

$\left|\Psi(t)\right\rangle$ を $\{\left|n\right\rangle\}$ を基底ベクトルとすると

状態関数の行列成分は次の通りになる。

$$\left|\Psi(t)\right\rangle = \begin{bmatrix} c_1(t) \\ c_2(t) \\ c_3(t) \\ c_n(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} c_1(0)e^{-i\frac{E_1}{\hbar}t} \\ c_2(0)e^{-i\frac{E_2}{\hbar}t} \\ c_3(0)e^{-i\frac{E_3}{\hbar}t} \\ c_n(0)e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t} \end{bmatrix} \quad \cdot\cdot⑥$$

基底ベクトルを $\left|u_n(t)\right\rangle = e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t}\left|n\right\rangle$ とすれば

状態関数の行列成分は次の通りになる。

$$\left|\Psi(t)\right\rangle = \begin{bmatrix} c_1(0) \\ c_2(0) \\ c_3(0) \\ c_n(0) \end{bmatrix} \quad \cdot\cdot⑦$$

演算子 $\hat{Q}$ のハイゼンベルグ表示は

$\hat{Q}\left|u_m(t)\right\rangle = \hat{Q}e^{-i\frac{E_m}{\hbar}t}\left|m\right\rangle$ 　$\hat{Q}$ は固有ベクトルのみに作用

$$\left\langle u_n(t)\right| = e^{i\frac{E_n}{\hbar}t}\left\langle n\right|$$

$$\left\langle u_n(t)\right|\hat{Q}\left|u_m(t)\right\rangle = e^{i\frac{E_n}{\hbar}t}e^{-i\frac{E_m}{\hbar}t}\left\langle n\right|\hat{Q}\left|m\right\rangle = e^{i\frac{(E_n-E_m)}{\hbar}t}\left\langle n\right|\hat{Q}\left|m\right\rangle$$

波動関数の時間変化を表示する演算子(1)

$$e^{\hat{A}}=1+\hat{A}+\frac{1}{2!}\hat{A}^{2}+\frac{1}{3!}\hat{A}^{3}+\quad+\frac{1}{k!}\hat{A}^{k}\quad\cdot\cdot⑧$$

$$e^{\hat{A}}=\sum_{k=0}^{\infty}\frac{1}{k!}\hat{A}^{k}\quad\cdot\cdot⑨$$

$$\sum_{k=0}^{\infty}\frac{1}{k!}\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{\mathbf{H}}\,t\right)^{k}=e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{\mathbf{H}}\,t}\quad\cdot\cdot⑩$$

$$e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{\mathrm{H}}\,t}\left|n\right\rangle=\sum_{k=0}^{\infty}\frac{1}{k!}\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{\mathrm{H}}\,t\right)^{k}\left|n\right\rangle$$

$$=\sum_{k=0}^{\infty}\frac{1}{k!}\left(-\frac{i}{\hbar}E_{n}t\right)^{k}\left|n\right\rangle\quad\cdot\cdot⑪$$

$$e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{\mathrm{H}}\,t}\left|n\right\rangle=e^{-\frac{i}{\hbar}E_{n}}\left|n\right\rangle\quad\cdot\cdot⑫$$

$$\left|\Psi(t)\right\rangle=\sum_{n=1}^{n}c_{n}(0)e^{-i\frac{E_{n}}{\hbar}t}\left|n\right\rangle$$

$$=\sum_{n=1}^{n}c_{n}(0)e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{\mathrm{H}}\,t}\left|n\right\rangle$$

$$=e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{\mathrm{H}}\,t}\sum_{n=1}^{n}c_{n}(0)\left|n\right\rangle\quad\cdot\cdot⑬$$

$$\left|\Psi(t)\right\rangle=e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{\mathrm{H}}\,t}\left|\Psi(0)\right\rangle\quad\cdot\cdot⑭$$

波動関数の時間変化を表示する演算子（２）

$$\left|\Psi(t_0)\right\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{\mathrm{H}}t_0}\left|\Psi(0)\right\rangle \quad \cdot\cdot⑮$$

$$\left|\Psi(t)\right\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{\mathrm{H}}(t-t_0)}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{\mathrm{H}}t_0}\left|\Psi(0)\right\rangle$$

$$\left|\Psi(t)\right\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{\mathrm{H}}(t-t_0)}\left|\Psi(t_0)\right\rangle \quad \cdot\cdot⑯$$

$t=t_0$における状態ベクトル$\left|\Psi(t_0)\right\rangle = \Psi(r,t_0)$

が求まれば、その他の時刻の状態ベクトルは

$e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{\mathrm{H}}(t-t_0)}$ を作用させることで求まる。

$$\left|u_m\right\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{\mathrm{H}}t}\left|m\right\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}E_m}\left|m\right\rangle$$

$$\left\langle u_n(t)\right| = \left\langle n\right|e^{\frac{i}{\hbar}\hat{\mathrm{H}}t}$$

演算子Qの行列要素は

$$\left\langle u_n(t)\middle|\hat{Q}\middle|u_m(t)\right\rangle = \left\langle n\right|e^{\frac{i}{\hbar}\hat{\mathrm{H}}t}\hat{Q}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{\mathrm{H}}t}\left|m\right\rangle \quad \cdot\cdot⑰$$

$$\hat{Q}(t) = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{\mathrm{H}}t}\hat{Q}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{\mathrm{H}}t} \quad \cdot\cdot⑱$$

演算子 $e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{\mathrm{H}}t}$ はシュレディンガー表示からハイゼンベルク表示への基底ベクトルの変換を表す。

$$\left\langle n\middle|\hat{Q}(t)\middle|m\right\rangle$$

波動関数の時間変化を表示する演算子（3）

物理量Qの期待値＜Q＞

$$<\hat{Q}>=\left\langle \psi(t)\middle|\hat{Q}\middle|\psi(t)\right\rangle \quad \cdot\cdot ⑲$$

演算子Qそのものに時間変化の性質はない。全て状態ベクトルの時間的変化により決まる。

状態ベクトルは変化せず演算子の方が時間とともに変化する記述も可能である。

$$\left|\Psi(t)\right\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t-t_0)}\left|\Psi(t_0)\right\rangle \quad \cdot\cdot ⑯$$

を用いる。

$$\hat{Q}(t) = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\,\hat{Q}\,e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}$$

$$<\hat{Q}>=\left\langle \psi(t)\middle|\hat{Q}\middle|\psi(t)\right\rangle$$

$$=\left\langle \psi(t_0)\middle|e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t-t_0)}\,\hat{Q}\,e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t-t_0)}\middle|\psi(t_0)\right\rangle$$

$$e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t-t_0)}\,\hat{Q}\,e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t-t_0)} = \hat{Q}(t-t_0)$$ とおくと ‥⑳

$$\left\langle \psi(t)\middle|\hat{Q}\middle|\psi(t)\right\rangle = \left\langle \psi(t_0)\middle|\hat{Q}(t-t_0)\middle|\psi(t_0)\right\rangle$$

状態ベクトルは時刻の基準$t=t_0$にとどまり,物理量を表す演算子 $\hat{Q}(t-t_0)$ の方が時間とともに変化する。

演算子の交換関係について（１）

$[A,B]=AB-BA$　と定義する。

$[cA,B]=cAB-BcA=c(AB-BA)=c[A,B]$　ここでcは定数とする。

$[A+B,C]=(A+B)C-C(A+B)=AC+BC-CA-CB=AC-CA+BC-CB=[A,C]+[B,C]$

$[A,B+C]=A(B+C)-(B+C)A=AB+AC-BA-CA=AB-BA+AC-CA=[A,B]+[A,C]$

$[B,A]=BA-AB=-(AB-BA)=-[A,B]$

$[A,A]=AA-AA=0$

$[A^2,B]=A^2B-BA^2=A^2B-ABA+ABA-BA^2=A(AB-BA)+(AB-BA)A=A[A,B]+[A,B]A$

$[A,B^2]=AB^2-B^2A=AB^2-BAB+BAB-B^2A=(AB-BA)B+B(AB-BA)=[A,B]B+B[A,B]$

演算子の交換関係について(2)

$$\left(\begin{array}{llll} [x, p_x] = i\hbar & [y, p_y] = i\hbar & [z, p_z] = i\hbar & \\ [L_y, L_z] = i\hbar L_x & [L_z, L_x] = i\hbar L_y & [L_x, L_y] = i\hbar L_z & \Longrightarrow \quad \vec{L} \times \vec{L} = i\hbar \vec{L} \end{array}\right)$$

$L^2 = L_x{}^2 + L_y{}^2 + L_z{}^2$ とおくと $[L^2, L_z] = [L_x{}^2, L_z] + [L_y{}^2, L_z] + [L_z{}^2, L_z]$

$$[L_x{}^2, L_z] = L_x[L_x, L_z] + [L_x, L_z]L_x = L_x(-i\hbar L_y) + (-i\hbar L_y)L_x = -i\hbar L_x L_y - i\hbar L_y L_x$$

$$[L_y{}^2, L_z] = L_y[L_y, L_z] + [L_y, L_z]L_y = L_y(i\hbar L_x) + (i\hbar L_x)L_y = i\hbar L_y L_x + i\hbar L_x L_y$$

$$[L_z{}^2, L_z] = L_z[L_z, L_z] + [L_z, L_z]L_z = L_z(0) + (0)L_z = 0$$

$[L_x{}^2 + L_y{}^2 + L_z{}^2, L_z] = [L^2, L_z] = 0$ となる。

同様に $[L_x{}^2 + L_y{}^2 + L_z{}^2, L_x] = [L^2, L_x] = 0$ $[L_x{}^2 + L_y{}^2 + L_z{}^2, L_y] = [L^2, L_y] = 0$

一般化された角運動量(1)

交換関係から一般的な角運動量を導く。

一般的に角運動量演算子 $\vec{J}$

が、下記の交換関係を満たすと仮定する。

$$\vec{J}\times\vec{J}=i\hbar\vec{J}$$

$$\left[J_y,J_z\right]=i\hbar J_x \quad \left[J_z,J_x\right]=i\hbar J_y \quad \left[J_x,J_y\right]=i\hbar J_z$$

$$\left[\vec{J}^2,J_z\right]=0 \quad \left[\vec{J}^2,J_x\right]=0 \quad \left[\vec{J}^2,J_y\right]=0$$

$$\vec{J}^2=J_x^2+J_y^2+J_z^2$$

は $\vec{J}$ の各成分と交換可能である。

したがって $\vec{J}^2$ と J_z

とが同時に確定値λとμを持つ状態が存在する。

$$\vec{J}^2\varphi=\lambda\varphi \quad ..① \qquad J_z\varphi=\mu\varphi \quad ..②$$

を同時に満足する $\varphi=\varphi(\lambda\quad\mu)$

が存在することになる。

一般化された角運動量（2）

$$\vec{J}^2\varphi - J_z{}^2\varphi = \lambda\varphi - \mu^2\varphi$$

$$\left(\vec{J}^2 - J_z{}^2\right)\varphi = \left(\lambda - \mu^2\right)\varphi$$

$$\left(J_x{}^2 + J_y{}^2\right)\varphi(\lambda, \mu) = \left(\lambda - \mu^2\right)\varphi(\lambda, \mu)$$

$\varphi = \varphi(\lambda, \mu)$ は、$J_x{}^2 + J_y{}^2$ の固有値 $\lambda - \mu^2$

に対する固有関数である。

また、$J_x{}^2 + J_y{}^2$ の固有値は負にならない。

なぜなら、エルミート演算子の固有値は実数である。

$$\left(\varphi, (J_x{}^2 + J_y{}^2)\varphi\right) = \left\langle J_x{}^2 + J_y{}^2 \right\rangle = \lambda - \mu^2 \geq 0$$

$\lambda \geq 0$ でかつ $\lambda \geq \mu^2$ $\therefore$ $\sqrt{\lambda} \geq |\mu|$

$J_+ = J_x + iJ_y \quad J_- = J_x - iJ_y$ と定義する。

$$\begin{aligned}
&[J_z, J_\pm] \\
&= [J_z, J_x \pm iJ_y] \\
&= [J_z, J_x] \pm i[J_z, J_y] \\
&= i\hbar J_y \mp ii\hbar J_x = i\hbar J_y \pm \hbar J_x = \pm\hbar\left(J_x \pm iJ_y\right) \\
&= \pm\hbar J_\pm
\end{aligned}$$

一般化された角運動量(3)

$$\left(J_z J_\pm - J_\pm J_z\right)\varphi(\lambda,\mu) = \pm\hbar J_\pm \varphi(\lambda,\mu)$$

$$J_z J_\pm \varphi(\lambda,\mu) = J_\pm J_z \varphi(\lambda,\mu) \pm \hbar J_\pm \varphi(\lambda,\mu)$$
$$= J_\pm \mu\varphi(\lambda,\mu) \pm \hbar J_\pm \varphi(\lambda,\mu)$$

$$J_z J_\pm \varphi(\lambda,\mu) = \left(\mu \pm \hbar\right) J_\pm \varphi(\lambda,\mu)$$

$J_\pm \varphi(\lambda,\mu)$ は J_z の固有値 $\mu \pm \hbar$

に対する固有関数である。

$$J_\pm \varphi(\lambda,\mu) = C\varphi(\lambda,\mu \pm \hbar)$$

$\vec{J}^2$ と J_z の固有値を λ,μ とすれば $\lambda,\quad \mu\pm\hbar$

も固有値であることを示している。

したがって

$\lambda,\ \mu-2\hbar\ :\lambda,\ \mu-\hbar\ :\lambda,\ \mu\ :\lambda,\mu+\hbar\ :\lambda,\ \mu+2\hbar$

が固有値の組となる。

$|\mu| \le \sqrt{\lambda}$ の関係より μ には最小値と最大値がある。

$\mu_0 \to$ 最小
$\mu_1 \to$ 最大
とすれば

$J_+ \quad J_-$ が固有値を増減させる昇降演算子の意味から

$$J_-\varphi(\lambda,\mu_0) = 0 \qquad J_+\varphi(\lambda,\mu_1) = 0$$

一般化された角運動量(4)

$$J_\mp J_\pm = (J_x \mp iJ_y)(J_x \pm iJ_y) = J_x{}^2 \pm iJ_xJ_y \mp iJ_yJ_x + J_y{}^2$$
$$= J_x{}^2 + J_y{}^2 \pm i(J_xJ_y - J_yJ_x) = J_x{}^2 + J_y{}^2 \pm ii\hbar J_z$$

$J_\mp J_\pm = J_x{}^2 + J_y{}^2 \mp \hbar J_z$ で演算すると

$$J_+J_-\varphi(\lambda,\mu_0) = (J_x{}^2 + J_y{}^2 + \hbar J_z)\varphi(\lambda,\mu_0)$$
$$= (\lambda - \mu_0{}^2 + \mu_0\hbar)\varphi(\lambda,\mu_0) = 0$$
$$J_-J_+\varphi(\lambda,\mu_1) = (J_x{}^2 + J_y{}^2 - \hbar J_z)\varphi(\lambda,\mu_1)$$
$$= (\lambda - \mu_1{}^2 - \mu_1\hbar)\varphi(\lambda,\mu_1) = 0$$

$\varphi(\lambda,\mu_0) \neq 0 \quad \varphi(\lambda,\mu_1) \neq 0$ なので

$$\lambda - \mu_0{}^2 + \mu_0\hbar = 0$$
$$\lambda - \mu_1{}^2 - \mu_1\hbar = 0$$

となり

$$\mu_1{}^2 - \mu_0{}^2 + \mu_0\hbar + \mu_1\hbar = 0$$
$$(\mu_1 + \mu_0)(\mu_1 - \mu_0) + \hbar(\mu_1 + \mu_0) = 0$$
$$(\mu_1 + \mu_0)(\mu_1 - \mu_0 + \hbar) = 0$$

$\mu_1 - \mu_0 \geq 0$ なので $\mu_1 + \mu_0 = 0 \quad \mu_0 = -\mu_1$

$$\mu_1 = \mu + j\hbar$$

$\mu_0 = \mu - j\hbar \quad \mu_1 - \mu_0 = 2j\hbar$ とすると

$$\mu_1 - \mu_0 = 2j\hbar \qquad \mu_1 = j\hbar$$
$$\mu_1 + \mu_0 = 0 \qquad 2\mu_1 = 2j\hbar \qquad \mu_0 = -j\hbar$$

$$\lambda - \mu_0{}^2 + \mu_0\hbar = 0 \qquad \lambda - (-j\hbar)^2 + (-j\hbar)\hbar = 0$$
$$\lambda - j^2\hbar^2 - j\hbar^2 = 0$$
$$\lambda = j^2\hbar^2 + j\hbar^2 = (j^2 + j)\hbar^2 = j(j+1)\hbar^2$$

一般化された角運動量(5)

$\vec{J} \times \vec{J} = i\hbar \vec{J}$ の交換関係を満足する $\vec{J}^2$ の固有値は $\lambda = j(j+1)\hbar^2$ であり

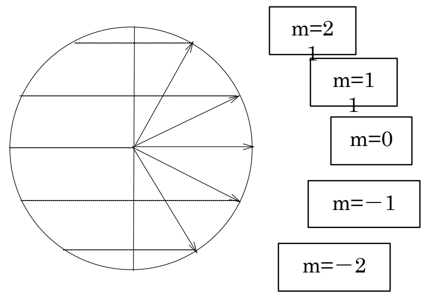
その固有状態は J_z の固有値 $\mu = m\hbar = j\hbar, (j-1)\hbar, \cdots, -j\hbar$ に対する $2j+1$ の縮重を持つ。

j は0または正の整数　あるいは半奇数 $j = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \frac{5}{2}$

角運動量 $\vec{J}^2$ の大きさが $\sqrt{\lambda} = \sqrt{j(j+1)\hbar^2} = \sqrt{j(j+1)}\hbar$

$j = 2$ とすれば $\sqrt{j(j+1)}\hbar = \sqrt{2(2+1)}\hbar = \sqrt{6}\hbar$

ベクトルの長さ $\sqrt{6}$　　縦軸はJ_z のm



一般化された角運動量（6）

$$\left\{\begin{array}{l}\vec{J}^2\varphi(j,m)=j(j+1)\varphi(j,m)\\ J_z\varphi(j,m)=m\hbar\varphi(j,m)\\ J_\pm\varphi(j,m)=C\varphi(j,m\pm1)\end{array}\right\}$$

$$(J_\pm\varphi, J_\pm\varphi)$$

$$((J_x\pm iJ_y)\varphi,(J_x\pm iJ_y)\varphi)=(C\varphi(j,m\pm1),C\varphi(j,m\pm1))$$

$$=C_\pm{}^*C_\pm(\varphi(j,m\pm1),\varphi(j,m\pm1))=C_\pm{}^*C_\pm=|C_\pm|^2$$

$$=(J_x\varphi,J_x\varphi)+(J_x\varphi,\pm iJ_y\varphi)+(\pm iJ_y\varphi,J_x\varphi)+(\pm iJ_y\varphi,\pm iJ_y\varphi)$$

$$=(\varphi,J_x{}^2\varphi)\pm i(\varphi,J_xJ_y\varphi)\mp i(\varphi,J_yJ_x\varphi)\mp i\pm i(\varphi,J_y{}^2\varphi)$$

$$=(\varphi,J_x{}^2\varphi)\pm i(\varphi,J_xJ_y\varphi)\mp i(\varphi,J_yJ_x\varphi)+(\varphi,J_y{}^2\varphi)$$

$$=\left(\varphi,\left(J_x{}^2+J_y{}^2\pm i\{J_xJ_y-J_yJ_x\}\right)\varphi\right)$$

$$=\left(\varphi,\left(J_x{}^2+J_y{}^2\pm ii\hbar J_z\right)\varphi\right)$$

$$=\left(\varphi,\left(J_x{}^2+J_y{}^2\mp\hbar J_z\right)\varphi\right)$$

$$=\left(\varphi,\left\{\vec{J}^2-J_z{}^2\mp\hbar J_z\right\}\varphi\right)$$

$$=\left(\varphi,\{j(j+1)\hbar^2-m^2\hbar^2\mp m\hbar^2\}\varphi\right)$$

$$=\{j(j+1)\hbar^2-m^2\hbar^2\mp m\hbar^2\}$$

$$=\{j(j+1)-m^2\mp m\}\hbar^2$$

$$=\{j(j+1)-m(m\pm1)\}\hbar^2$$

$$|C_\pm|^2=\{j(j+1)-m(m\pm1)\}\hbar^2$$

一般化された角運動量(7)

$$
\begin{aligned}
\left|C_{\pm}\right| &= \hbar\sqrt{j(j+1)-m(m\pm 1)} \\
&= \hbar\sqrt{j^2+j-m^2\mp m} \\
&= \hbar\sqrt{(j-m)(j+m)+(j\mp m)} \\
&= \hbar\sqrt{(j\mp m)(j\pm m)+(j\mp m)} \\
&= \hbar\sqrt{(j\mp m)(j\pm m+1)}
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
J_{\pm}\varphi(j,m) &= \left(J_x \pm iJ_y\right)\varphi(j,m) \\
&= \hbar\sqrt{(j\mp m)(j\pm m+1)}\varphi(j,m\pm 1)
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
J_{+}\varphi(j,m) &= \left(J_x + iJ_y\right)\varphi(j,m) \\
&= \hbar\sqrt{(j-m)(j+m+1)}\varphi(j,m+1)
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
J_{-}\varphi(j,m) &= \left(J_x - iJ_y\right)\varphi(j,m) \\
&= \hbar\sqrt{(j+m)(j-m+1)}\varphi(j,m-1)
\end{aligned}
$$

一般化された角運動量（８）

$$(J_x + iJ_y)\varphi(j,m) + (J_x - iJ_y)\varphi(j,m) = J_+\varphi(j,m) + J_-\varphi(j,m)$$

$$2J_x\varphi(j,m) = \hbar\sqrt{(j-m)(j+m+1)}\varphi(j,m+1) + \hbar\sqrt{(j+m)(j-m+1)}\varphi(j,m-1)$$

$$J_x\varphi(j,m) = \frac{\hbar}{2}\left\{\sqrt{(j-m)(j+m+1)}\varphi(j,m+1) + \sqrt{(j+m)(j-m+1)}\varphi(j,m-1)\right\}$$

$$(J_x + iJ_y)\varphi(j,m) - (J_x - iJ_y)\varphi(j,m) = J_+\varphi(j,m) - J_-\varphi(j,m)$$

$$2iJ_y\varphi(j,m) = \hbar\sqrt{(j-m)(j+m+1)}\varphi(j,m+1) - \hbar\sqrt{(j+m)(j-m+1)}\varphi(j,m-1)$$

$$J_y\varphi(j,m) = \frac{\hbar}{2i}\left\{\sqrt{(j-m)(j+m+1)}\varphi(j,m+1) - \sqrt{(j+m)(j-m+1)}\varphi(j,m-1)\right\}$$

$$J_z\varphi(j,m) = m\hbar\varphi(j,m)$$

スピン角運動量の行列表現(1)

ブラベクトル表示を用いると

$$J^2\left|J,\quad M\right\rangle = J(J+1)\hbar^2\left|J,\quad M\right\rangle \qquad J_z\left|J,\quad M\right\rangle = M\hbar\left|J,\quad M\right\rangle$$

$M = -J, -(J-1), \cdots, 0, 1, \cdots, J-1, J$ の2J+1個の縮重あり

J のとき $J_{\pm}\left|J,\quad M\right\rangle = \hbar\sqrt{(J \mp M)(J \pm M + 1)}\left|J,\quad M \pm 1\right\rangle$

$$\left\langle J \quad M'\right|J_{\pm}\left|J,\quad M\right\rangle = \hbar\sqrt{(J \mp M)(J \pm M + 1)}\left\langle J \quad M'\middle|J,\quad M \pm 1\right\rangle$$

$$= \hbar\sqrt{(J \mp M)(J \pm M + 1)}\,\delta_{M',\quad M \pm 1}$$

$$\left\langle J \quad M'\right|J^2\left|J,\quad M\right\rangle = J(J+1)\hbar^2\delta_{M',\quad M}$$

$$\left\langle J \quad M'\right|J_z\left|J,\quad M\right\rangle = M\hbar\delta_{M',\quad M}$$

スピン角運動量の行列表現（２）

$J=\frac{1}{2}$ について計算する。2行2列の行列表現となる。

$$\langle J \quad M'|J_{\pm}|J, \quad M\rangle = \hbar\sqrt{(J\mp M)(J\pm M+1)}\,\delta_{M', \quad M\pm 1}$$

（ア）　$M'=\frac{1}{2}$　$M=\frac{1}{2}$　１行１列

$$\langle J \quad M'|J_{\pm}|J, \quad M\rangle = \hbar\sqrt{\left(\frac{1}{2}\mp\frac{1}{2}\right)\left(\frac{1}{2}\pm\frac{1}{2}+1\right)}\,\delta_{\frac{1}{2}, \quad \frac{1}{2}\pm 1}$$

$$\langle J \quad M'|J_{+}|J, \quad M\rangle = \hbar\sqrt{\left(\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\right)\left(\frac{1}{2}+\frac{1}{2}+1\right)}\,\delta_{\frac{1}{2}, \quad \frac{1}{2}+1} = 0$$

$$\langle J \quad M'|J_{-}|J, \quad M\rangle = \hbar\sqrt{\left(\frac{1}{2}+\frac{1}{2}\right)\left(\frac{1}{2}-\frac{1}{2}+1\right)}\,\delta_{\frac{1}{2}, \quad \frac{1}{2}-1} = 0$$

$$\langle J \quad M'|J_{z}|J, \quad M\rangle = \frac{1}{2}\hbar\delta_{\frac{1}{2}, \quad \frac{1}{2}} = \frac{1}{2}\hbar$$

$$\langle J \quad M'|J^{2}|J, \quad M\rangle = \frac{1}{2}\left(\frac{1}{2}+1\right)\hbar^{2}\delta_{1', \quad 1} = \frac{3}{4}\hbar^{2}$$

（イ）　$M'=\frac{1}{2}$　$M=-\frac{1}{2}$　１行２列

$$\langle J \quad M'|J_{\pm}|J, \quad M\rangle = \hbar\sqrt{\left(\frac{1}{2}\mp(-\frac{1}{2})\right)\left(\frac{1}{2}\pm(-\frac{1}{2})+1\right)}\,\delta_{\frac{1}{2}, \quad (-\frac{1}{2})\pm 1}$$

$$\langle J \quad M'|J_{+}|J, \quad M\rangle = \hbar\sqrt{\left(\frac{1}{2}-(-\frac{1}{2})\right)\left(\frac{1}{2}+(-\frac{1}{2})+1\right)}\,\delta_{\frac{1}{2}, \quad (-\frac{1}{2})+1} = \hbar$$

$$\langle J \quad M'|J_{-}|J, \quad M\rangle = \hbar\sqrt{\left(\frac{1}{2}+(-\frac{1}{2})\right)\left(\frac{1}{2}-(-\frac{1}{2})+1\right)}\,\delta_{\frac{1}{2}, \quad (-\frac{1}{2})-1} = 0$$

$$\langle J \quad M'|J_{z}|J, \quad M\rangle = -\frac{1}{2}\hbar\delta_{\frac{1}{2}, \quad -\frac{1}{2}} = 0$$

$$\langle J \quad M'|J^{2}|J, \quad M\rangle = \frac{1}{2}\left(\frac{1}{2}+1\right)\hbar^{2}\delta_{\frac{1}{2}, \quad -\frac{1}{2}} = 0$$

スピン角運動量の行列表現（3）

$J=\frac{1}{2}$ について計算する。 $\langle J \quad M'|J_\pm|J, \quad M\rangle=\hbar\sqrt{(J\mp M)(J\pm M+1)}\delta_{M', \quad M\pm1}$

（ウ） $M'=-\frac{1}{2} \quad M=\frac{1}{2}$ 2行1列

$$\langle J \quad M'|J_\pm|J, \quad M\rangle=\hbar\sqrt{\left(\frac{1}{2}\mp\frac{1}{2}\right)\left(\frac{1}{2}\pm\frac{1}{2}+1\right)}\delta_{-\frac{1}{2}, \quad \frac{1}{2}\pm1}$$

$$\langle J \quad M'|J_+|J, \quad M\rangle=\hbar\sqrt{\left(\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\right)\left(\frac{1}{2}+\frac{1}{2}+1\right)}\delta_{-\frac{1}{2}, \quad \frac{1}{2}+1}=0$$

$$\langle J \quad M'|J_-|J, \quad M\rangle=\hbar\sqrt{\left(\frac{1}{2}+\frac{1}{2}\right)\left(\frac{1}{2}-\frac{1}{2}+1\right)}\delta_{-\frac{1}{2}, \quad \frac{1}{2}-1}=\hbar$$

$$\langle J \quad M'|J_z|J, \quad M\rangle=\frac{1}{2}\hbar\delta_{-\frac{1}{2}, \quad \frac{1}{2}}=0$$

$$\langle J \quad M'|J^2|J, \quad M\rangle=\frac{1}{2}(\frac{1}{2}+1)\hbar^2\delta_{-\frac{1}{2}, \quad \frac{1}{2}}=0$$

（エ） $M'=-\frac{1}{2} \quad M=-\frac{1}{2}$ 2行2列

$$\langle J \quad M'|J_\pm|J, \quad M\rangle=\hbar\sqrt{\left(\frac{1}{2}\mp(-\frac{1}{2})\right)\left(\frac{1}{2}\pm(-\frac{1}{2})+1\right)}\delta_{-\frac{1}{2}, \quad (-\frac{1}{2})\pm1}$$

$$\langle J \quad M'|J_+|J, \quad M\rangle=\hbar\sqrt{\left(\frac{1}{2}-(-\frac{1}{2})\right)\left(\frac{1}{2}+(-\frac{1}{2})+1\right)}\delta_{-\frac{1}{2}, \quad (-\frac{1}{2})+1}=0$$

$$\langle J \quad M'|J_-|J, \quad M\rangle=\hbar\sqrt{\left(\frac{1}{2}+(-\frac{1}{2})\right)\left(\frac{1}{2}-(-\frac{1}{2})+1\right)}\delta_{-\frac{1}{2}, \quad (-\frac{1}{2})-1}=0$$

$$\langle J \quad M'|J_z|J, \quad M\rangle=-\frac{1}{2}\hbar\delta_{-\frac{1}{2}, \quad -\frac{1}{2}}=-\frac{1}{2}\hbar$$

$$\langle J \quad M'|J^2|J, \quad M\rangle=\frac{1}{2}(\frac{1}{2}+1)\hbar^2\delta_{-\frac{1}{2}, \quad -\frac{1}{2}}=\frac{3}{4}\hbar^2$$

スピン角運動量の行列表現(4)

$$J_+ = \hbar\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \quad J_- = \hbar\begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \quad J_z = \frac{\hbar}{2}\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$$

$$J_+ = J_x + iJ_y \quad J_- = J_x - iJ_y \quad \Rightarrow \quad J_x = \frac{1}{2}(J_+ + J_-) \quad J_y = \frac{1}{2i}(J_+ - J_-)$$

$J = \frac{1}{2}$ のとき

$$J_x = \frac{\hbar}{2}\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \quad J_y = \frac{\hbar}{2i}\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{bmatrix} = \frac{\hbar}{2}\begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix} \quad J_z = \frac{\hbar}{2}\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \quad J^2 = \frac{3}{4}\hbar^2\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

粒子のスピンは、軌道角運動量とは異なりその粒子に固有の内部自由度に関わる一般化された角運動量の一種である。スピン角運動量は、粒子の位置 $\vec{r}$ や運動量 $\vec{p}$ のような力学変数とは無関係の独自の自由度に基づく。

スピン角運動量の行列表現(5)

2行2列のパウリ行列を導入すると ⇒
$$\left(\sigma_x = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \quad \sigma_y = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix} \quad \sigma_z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}\right)$$

$S = \dfrac{1}{2}$ のとき

$$S_x = \frac{\hbar}{2}\sigma_x \qquad S_y = \frac{\hbar}{2}\sigma_y \qquad S_z = \frac{\hbar}{2}\sigma_z \qquad S^2 = \frac{3}{4}\hbar^2 \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$\sigma_x{}^2 = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \quad \sigma_y{}^2 = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \quad \sigma_z{}^2 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \quad \sigma^2 = 3\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$S^2 = S_x{}^2 + S_x{}^2 + S_x{}^2 = \left(\frac{\hbar}{2}\sigma_x\right)^2 + \left(\frac{\hbar}{2}\sigma_y\right)^2 + \left(\frac{\hbar}{2}\sigma_z\right)^2 = \frac{\hbar^2}{4}\left(\sigma_x{}^2 + \sigma_y{}^2 + \sigma_z{}^2\right) = \frac{\hbar^2}{4}\sigma^2 = \frac{3}{4}\hbar^2 \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

★スピン演算子は、何らかの変数の微分演算子という形では書けない。
行列表示で示すしか方法はない。(Pauli)

スピン角運動量の行列表現(6)

$$S_z = \frac{\hbar}{2}\sigma_z = \frac{\hbar}{2}\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \qquad \alpha = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \quad \beta = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$$

とおいてスピン演算子に作用させると

$$S_z\alpha = \frac{\hbar}{2}\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \frac{\hbar}{2}\begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \frac{\hbar}{2}\alpha \qquad S_z\beta = \frac{\hbar}{2}\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} = \frac{\hbar}{2}\begin{bmatrix} 0 \\ -1 \end{bmatrix} = -\frac{\hbar}{2}\begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} = -\frac{\hbar}{2}\beta$$

$\alpha = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}$ は固有値が $\frac{\hbar}{2}$ の固有関数で $\beta = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$ は固有値が $-\frac{\hbar}{2}$ の固有関数であることを示している。

一般にスピン $\frac{1}{2}$ の粒子の波動関数の φ 中には、上向きの成分と、下向きの成分が含まれる。

$$\varphi = \varphi_+(\vec{r})\begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} + \varphi_-(\vec{r})\begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \varphi_+(\vec{r}) \\ \varphi_-(\vec{r}) \end{bmatrix}$$

角運動量の行列表現(１)

$J=1$ について計算する。3行3列の行列表現となる。 $\langle J\quad M'|J_\pm|J,\quad M\rangle=\hbar\sqrt{(J\mp M)(J\pm M+1)}\delta_{M',\quad M\pm1}$

$\langle J\quad M'|J_z|J,\quad M\rangle=M\hbar\delta_{M',\quad M}$ $\langle J\quad M'|J^2|J,\quad M\rangle=J(J+1)\hbar^2\delta_{M',\quad M}$

（ア） $M'=1$ $M=1$ 1行1列

$$\langle J\quad M'|J_\pm|J,\quad M\rangle=\hbar\sqrt{(1\mp1)(1\pm1+1)}\delta_{1',\quad 1\pm1}$$

$$\langle J\quad M'|J_+|J,\quad M\rangle=\hbar\sqrt{(1-1)(1+1+1)}\delta_{1,\quad 1+1}=0$$

$$\langle J\quad M'|J_-|J,\quad M\rangle=\hbar\sqrt{(1+1)(1-1+1)}\delta_{1,\quad 1-1}=0$$

$$\langle J\quad M'|J_z|J,\quad M\rangle=\hbar\delta_{1,\quad 1}=\hbar$$

$$\langle J\quad M'|J^2|J,\quad M\rangle=1(1+1)\hbar^2\delta_{1',\quad 1}=2\hbar^2$$

（イ） $M'=1$ $M=0$ 1行2列

$$\langle J\quad M'|J_\pm|J,\quad M\rangle=\hbar\sqrt{(1\mp(0))(1\pm(0)+1)}\delta_{1,\quad (0)\pm1}$$

$$\langle J\quad M'|J_+|J,\quad M\rangle=\hbar\sqrt{(1-(0))(1+(0)+1)}\delta_{1,\quad (0)+1}=\hbar\sqrt{2}$$

$$\langle J\quad M'|J_-|J,\quad M\rangle=\hbar\sqrt{(1+(0))(1-(0)+1)}\delta_{1,\quad (0)-1}=0$$

$$\langle J\quad M'|J_z|J,\quad M\rangle=0\cdot\hbar\delta_{1,\quad 0}=0$$

$$\langle J\quad M'|J^2|J,\quad M\rangle=1(1+1)\hbar^2\delta_{1,\quad 0}=0$$

角運動量の行列表現(2)

$J=1$ について計算する。3行3列の行列表現となる。 $\langle J \quad M'|J_\pm|J, \quad M\rangle = \hbar\sqrt{(J\mp M)(J\pm M+1)}\delta_{M',\ M\pm1}$

$\langle J \quad M'|J_z|J, \quad M\rangle = M\hbar\delta_{M',\ M}$ $\langle J \quad M'|J^2|J, \quad M\rangle = J(J+1)\hbar^2\delta_{M',\ M}$

（ウ） $M'=1 \qquad M=-1$ 1行3列

$$\langle J \quad M'|J_\pm|J, \quad M\rangle = \hbar\sqrt{(1\mp(-1))(1\pm(-1)+1)}\delta_{1,\ (-1)\pm1}$$

$$\langle J \quad M'|J_+|J, \quad M\rangle = \hbar\sqrt{(1-(-1))(1+(-1)+1)}\delta_{1,\ (-1)+1} = 0$$

$$\langle J \quad M'|J_-|J, \quad M\rangle = \hbar\sqrt{(1+(-1))(1-(-1)+1)}\delta_{1,\ (-1)-1} = 0$$

$$\langle J \quad M'|J_z|J, \quad M\rangle = -\hbar\delta_{1,\ -1} = 0$$

$$\langle J \quad M'|J^2|J, \quad M\rangle = 1(1+1)\hbar^2\delta_{1,\ -1} = 0$$

（エ） $M'=0 \qquad M=1$ 2行1列

$$\langle J \quad M'|J_\pm|J, \quad M\rangle = \hbar\sqrt{(1\mp(1))(1\pm(1)+1)}\delta_{0,\ (1)\pm1}$$

$$\langle J \quad M'|J_+|J, \quad M\rangle = \hbar\sqrt{(1-(1))(1+(1)+1)}\delta_{0,\ (1)+1} = 0$$

$$\langle J \quad M'|J_-|J, \quad M\rangle = \hbar\sqrt{(1+(1))(1-(1)+1)}\delta_{0,\ (1)-1} = \hbar\sqrt{2}$$

$$\langle J \quad M'|J_z|J, \quad M\rangle = 1\cdot\hbar\delta_{0,\ 1} = 0$$

$$\langle J \quad M'|J^2|J, \quad M\rangle = 1(1+1)\hbar^2\delta_{0,\ 1} = 0$$

角運動量の行列表現（3）

$J=1$ について計算する。3行3列の行列表現となる。 $\langle J \quad M'|J_{\pm}|J, \quad M\rangle = \hbar\sqrt{(J\mp M)(J\pm M+1)}\delta_{M',\ M\pm1}$

$\langle J \quad M'|J_z|J, \quad M\rangle = M\hbar\delta_{M',\ M}$ $\langle J \quad M'|J^2|J, \quad M\rangle = J(J+1)\hbar^2\delta_{M',\ M}$

（オ） $M'=0$ $M=0$ 2行2列

$$\langle J \quad M'|J_{\pm}|J, \quad M\rangle = \hbar\sqrt{(1\mp(0))(1\pm(0)+1)}\delta_{0,\ 0\pm1}$$

$$\langle J \quad M'|J_{+}|J, \quad M\rangle = \hbar\sqrt{(1-(0))(1+(0)+1)}\delta_{0,\ 0+1} = 0$$

$$\langle J \quad M'|J_{-}|J, \quad M\rangle = \hbar\sqrt{(1+(0))(1-(0)+1)}\delta_{1,\ 0-1} = 0$$

$$\langle J \quad M'|J_z|J, \quad M\rangle = 0\cdot\hbar\delta_{0,\ 0} = 0$$

$$\langle J \quad M'|J^2|J, \quad M\rangle = 1(1+1)\hbar^2\delta_{0,\ 0} = 2\hbar^2$$

（カ） $M'=0$ $M=-1$ 2行3列

$$\langle J \quad M'|J_{\pm}|J, \quad M\rangle = \hbar\sqrt{(1\mp(-1))(1\pm(-1)+1)}\delta_{0,\ (-1)\pm1}$$

$$\langle J \quad M'|J_{+}|J, \quad M\rangle = \hbar\sqrt{(1-(-1))(1+(-1)+1)}\delta_{0,\ (-1)+1} = \hbar\sqrt{2}$$

$$\langle J \quad M'|J_{-}|J, \quad M\rangle = \hbar\sqrt{(1+(-1))(1-(-1)+1)}\delta_{0,\ (-1)-1} = 0$$

$$\langle J \quad M'|J_z|J, \quad M\rangle = -1\cdot\hbar\delta_{0,\ -1} = 0$$

$$\langle J \quad M'|J^2|J, \quad M\rangle = 1(1+1)\hbar^2\delta_{0,\ -1} = 0$$

角運動量の行列表現（４）

$J=1$ について計算する。3行3列の行列表現となる。 $\langle J\quad M'|J_\pm|J,\quad M\rangle=\hbar\sqrt{(J\mp M)(J\pm M+1)}\delta_{M',\quad M\pm1}$

$\langle J\quad M'|J_z|J,\quad M\rangle=M\hbar\delta_{M',\quad M}$ $\langle J\quad M'|J^2|J,\quad M\rangle=J(J+1)\hbar^2\delta_{M',\quad M}$

（キ） $M'=-1$ $M=1$ 3行１列

$$\langle J\quad M'|J_\pm|J,\quad M\rangle=\hbar\sqrt{(1\mp(1))(1\pm(1)+1)}\delta_{-1,\quad 1\pm1}$$

$$\langle J\quad M'|J_+|J,\quad M\rangle=\hbar\sqrt{(1-(1))(1+(1)+1)}\delta_{-1,\quad 1+1}=0$$

$$\langle J\quad M'|J_-|J,\quad M\rangle=\hbar\sqrt{(1+(1))(1-(1)+1)}\delta_{-1,\quad 1-1}=0$$

$$\langle J\quad M'|J_z|J,\quad M\rangle=1\cdot\hbar\delta_{-1,\quad 1}=0$$

$$\langle J\quad M'|J^2|J,\quad M\rangle=1(1+1)\hbar^2\delta_{-1,\quad 1}=0$$

（ク） $M'=-1$ $M=0$ 3行2列

$$\langle J\quad M'|J_\pm|J,\quad M\rangle=\hbar\sqrt{(1\mp(0))(1\pm(0)+1)}\delta_{-1,\quad (0)\pm1}$$

$$\langle J\quad M'|J_+|J,\quad M\rangle=\hbar\sqrt{(1-(0))(1+(0)+1)}\delta_{-1,\quad (0)+1}=0$$

$$\langle J\quad M'|J_-|J,\quad M\rangle=\hbar\sqrt{(1+(0))(1-(0)+1)}\delta_{-1,\quad (0)-1}=\hbar\sqrt{2}$$

$$\langle J\quad M'|J_z|J,\quad M\rangle=0\cdot\hbar\delta_{-1,\quad 0}=0$$

$$\langle J\quad M'|J^2|J,\quad M\rangle=1(1+1)\hbar^2\delta_{-1,\quad 0}=0$$

角運動量の行列表現(5)

$J=1$ について計算する。3行3列の行列表現となる。 $\left\langle J \quad M'\middle|J_\pm\middle|J,\quad M\right\rangle=\hbar\sqrt{(J\mp M)(J\pm M+1)}\delta_{M',\ M\pm1}$

$\left\langle J \quad M'\middle|J_z\middle|J,\quad M\right\rangle=M\hbar\delta_{M',\ M}$ $\left\langle J \quad M'\middle|J^2\middle|J,\quad M\right\rangle=J(J+1)\hbar^2\delta_{M',\ M}$

（ケ） $M'=-1$ $M=-1$ 3行3列

$$\left\langle J \quad M'\middle|J_\pm\middle|J,\quad M\right\rangle=\hbar\sqrt{(1\mp(-1))(1\pm(-1)+1)}\delta_{-1,\ (-1)\pm1}$$

$$\left\langle J \quad M'\middle|J_+\middle|J,\quad M\right\rangle=\hbar\sqrt{(1-(-1))(1+(-1)+1)}\delta_{-1,\ (-1)+1}=0$$

$$\left\langle J \quad M'\middle|J_-\middle|J,\quad M\right\rangle=\hbar\sqrt{(1+(-1))(1-(-1)+1)}\delta_{-1,\ (-1)-1}=0$$

$$\left\langle J \quad M'\middle|J_z\middle|J,\quad M\right\rangle=-1\cdot\hbar\delta_{-1,\ -1}=-\hbar$$

$$\left\langle J \quad M'\middle|J^2\middle|J,\quad M\right\rangle=1(1+1)\hbar^2\delta_{-1,\ -1}=2\hbar^2$$

角運動量の行列表現（6）

$$J_+ = \hbar\begin{bmatrix} 0 & \sqrt{2} & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2} \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad J_- = \hbar\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{2} & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2} & 0 \end{bmatrix} \quad J_z = \hbar\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}$$

$$J_+ = J_x + iJ_y \quad J_- = J_x - iJ_y \quad \Rightarrow \quad J_x = \frac{1}{2}(J_+ + J_-) \quad J_y = \frac{1}{2i}(J_+ - J_-)$$

$J=1$　のとき

$$J_x = \frac{\hbar}{2}\begin{bmatrix} 0 & \sqrt{2} & 0 \\ \sqrt{2} & 0 & \sqrt{2} \\ 0 & \sqrt{2} & 0 \end{bmatrix} = \frac{\hbar}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \quad J_y = \frac{\hbar}{2i}\begin{bmatrix} 0 & \sqrt{2} & 0 \\ -\sqrt{2} & 0 & \sqrt{2} \\ 0 & -\sqrt{2} & 0 \end{bmatrix} = \frac{\hbar}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{bmatrix}$$

$$J_z = \hbar\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} \quad J^2 = 2\hbar^2\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

角運動量の合成(1)

$\vec{J} = \vec{J}_1 + \vec{J}_2$ とする。

$$\vec{J} \times \vec{J} = \left(\vec{J}_1 + \vec{J}_2\right) \times \left(\vec{J}_1 + \vec{J}_2\right) \quad \cdots ①$$

$$\vec{J} \times \vec{J} = \vec{J}_1 \times \vec{J}_1 + \vec{J}_1 \times \vec{J}_2 + \vec{J}_2 \times \vec{J}_1 + \vec{J}_2 \times \vec{J}_2$$

$$\left(\vec{J}_1 \times \vec{J}_2 + \vec{J}_2 \times \vec{J}_1\right)_x = J_{1y}J_{2z} - J_{2z}J_{1y} + J_{2y}J_{1z} - J_{1z}J_{2y}$$

$$\left(\vec{J}_1 \times \vec{J}_2 + \vec{J}_2 \times \vec{J}_1\right)_x = \left[J_{1y}, J_{2z}\right] + \left[J_{2y}, J_{1z}\right]$$

$$\left.\begin{aligned}
\left(\vec{J}_1 \times \vec{J}_2 + \vec{J}_2 \times \vec{J}_1\right)_x &= \left[J_{1y}, J_{2z}\right] - \left[J_{1z}, J_{2y}\right] = 0 \\
\left(\vec{J}_1 \times \vec{J}_2 + \vec{J}_2 \times \vec{J}_1\right)_y &= \left[J_{1z}, J_{2x}\right] - \left[J_{1x}, J_{2z}\right] = 0 \\
\left(\vec{J}_1 \times \vec{J}_2 + \vec{J}_2 \times \vec{J}_1\right)_z &= \left[J_{1x}, J_{2y}\right] - \left[J_{1y}, J_{2x}\right] = 0
\end{aligned}\right\} \quad \cdots ②$$

$$\vec{J}_1 \times \vec{J}_2 + \vec{J}_2 \times \vec{J}_1 = 0 \quad \cdots ③$$

$$\vec{J} \times \vec{J} = \vec{J}_1 \times \vec{J}_1 + \vec{J}_2 \times \vec{J}_2 \quad \cdots ④$$

$$\vec{J} \times \vec{J} = i\hbar \vec{J}_1 + i\hbar \vec{J}_2 = i\hbar\left(\vec{J}_1 + \vec{J}_2\right) = i\hbar \vec{J} \quad \cdots ⑤$$

$\vec{J} = \vec{J}_1 + \vec{J}_2$ に対しても、$\vec{J}_1, \vec{J}_2$ におけると同じ交換関係が成立する。

$\vec{J}^{\,2}$ の固有値 ⇨ $j(j+1)\hbar^2$

角運動量の合成(２)

$\vec{J}^{\,2}$ と J_z の固有値 $j(j+1)\hbar^2$ と $m\hbar$

$|m| \leq j$ に対する固有関数 $\psi(j,m)$

を求める。

$$\left\{\begin{array}{lll} \vec{J}_1 \quad J_{1z} & \Rightarrow & \varphi(j_1, m_1) \\ \vec{J}_2 \quad J_{2z} & \Rightarrow & \chi(j_2, m_2) \end{array}\right\}$$

$\varphi(j_1, m_1)$ と $\chi(j_2, m_2)$ の一次結合で 固有関数 $\psi(j,m)$ を表すと

$$\psi(j,m) = \sum_{j_1 m_1} \sum_{j_2 m_2} C_{jm:j_1 m_1:j_2 m_2} \varphi(j_1, m_1) \chi(j_2, m_2)$$ となる。

$J_z = J_{z1} + J_{z2}$ に対して $J_z \psi(j,m) = (J_{z1} + J_{z2}) \sum_{j_1 m_1} \sum_{j_2 m_2} C_{jm:j_1 m_1:j_2 m_2} \varphi(j_1, m_1) \chi(j_2, m_2)$

$$J_z \psi(j,m) = \sum_{j_1 m_1} \sum_{j_2 m_2} C_{jm:j_1 m_1:j_2 m_2} J_{z1} \varphi(j_1, m_1) \chi(j_2, m_2) + \sum_{j_1 m_1} \sum_{j_2 m_2} C_{jm:j_1 m_1:j_2 m_2} \varphi(j_1, m_1) J_{z2} \chi(j_2, m_2)$$

角運動量の合成(3)

$$J_z\psi(j,m)=\sum_{j_1m_1}\sum_{j_2m_2}C_{jm:j_1m_1:j_2m_2}m_1\hbar\varphi(j_1,m_1)\chi(j_2,m_2)+\sum_{j_1m_1}\sum_{j_2m_2}C_{jm:j_1m_1:j_2m_2}m_2\hbar\varphi(j_1,m_1)J_{z2}\chi(j_2,m_2)$$

$$J_z\psi(j,m)=(m_1+m_2)\hbar\sum_{j_1m_1}\sum_{j_2m_2}C_{jm:j_1m_1:j_2m_2}\varphi(j_1,m_1)\chi(j_2,m_2)$$

$$J_z\psi(j,m)=m\hbar\sum_{j_1m_1}\sum_{j_2m_2}C_{jm:j_1m_1:j_2m_2}\varphi(j_1,m_1)\chi(j_2,m_2)\quad\cdots⑥$$

$m_1+m_2=m$ を満たすもののみ存在できる

m の最大値 J_1+J_2 $\Rightarrow$ J の最大値 $|m|\le J$

$\psi(j_1+j_2,j_1+j_2)=\varphi(j_1,m_1)\chi(j_2,m_2)$ この両辺に $J_-=J_{1-}+J_{2-}$ を演算すると

$$J_-\psi(j_1+j_2,j_1+j_2)=(J_{1-}+J_{2-})\varphi(j_1,m_1)\chi(j_2,m_2)=J_{1-}\varphi(j_1,m_1)\chi(j_2,m_2)+\varphi(j_1,m_1)J_{2-}\chi(j_2,m_2)$$

$$\hbar\sqrt{(j_1+j_2+j_1+j_2)(j_1+j_2-j_1-j_2+1)}\psi(j,j_1+j_2-1)$$

$$=\hbar\sqrt{(j_1+j_1)(j_1-j_1+1)}\varphi(j_1,j_1-1)\chi(j_1,j_1)+\hbar\sqrt{(j_2+j_2)(j_2-j_2+1)}\varphi(j_1,j_1)\chi(j_2,j_2-1)$$

角運動量の合成(4)

$$\sqrt{2(j_1+j_2)}\psi(j_1+j_2, j_1+j_2-1)=\sqrt{2j_1}\varphi(j_1, j_1-1)\chi(j_2, j_2)+\sqrt{2j_2}\varphi(j_1, j_1)\chi(j_2, j_2-1)$$

$$\psi(j_1+j_2, j_1+j_2-1)=\frac{\sqrt{2j_1}}{\sqrt{2(j_1+j_2)}}\varphi(j_1, j_1-1)\chi(j_2, j_2)+\frac{\sqrt{2j_2}}{\sqrt{2(j_1+j_2)}}\varphi(j_1, j_1)\chi(j_2, j_2-1) \quad \cdots ⑦$$

この式は $J=J_1+J_2$ であり $m=m_1+m_2=J_1+J_2-1$ である固有関数を表す。

$$\begin{cases} m_1=J_1-1 \\ m_2=J_2 \end{cases} \qquad \begin{cases} m_1=J_1 \\ m_2=J_2-1 \end{cases} \quad \cdots ⑧$$

この固有関数に直交する関数は、

$$\psi'=\frac{\sqrt{2j_2}}{\sqrt{2(j_1+j_2)}}\varphi(j_1, j_1-1)\chi(j_2, j_2)-\frac{\sqrt{2j_1}}{\sqrt{2(j_1+j_2)}}\varphi(j_1, j_1)\chi(j_2, j_2-1) \quad \cdots ⑨$$ であり

$m=m_1+m_2=J_1+J_2-1$ であるのだが、$\psi(j_1+j_2, j_1+j_2-1)$ と直交するので $J=J_1+J_2$ の固有関数ではあり得ない。$m=J_1+J_2-1$ を最大とする固有関数となり、$\psi(j_1+j_2-1, j_1+j_2-1)$ である。

角運動量の合成(5)

$$\psi(j_1+j_2-1, j_1+j_2-1) = \frac{\sqrt{2j_2}}{\sqrt{2(j_1+j_2)}}\varphi(j_1, j_1-1)\chi(j_2, j_2) - \frac{\sqrt{2j_1}}{\sqrt{2(j_1+j_2)}}\varphi(j_1, j_1)\chi(j_2, j_2-1)$$

$J\_\psi(j_1+j_2, j_1+j_2-1) = C'\psi(j_1+j_2, j_1+j_2-2)$　　$J\_\psi(j_1+j_2-1, j_1+j_2-1) = C''\psi(j_1+j_2-1, j_1+j_2-2)$

$\psi(j_1+j_2, j_1+j_2-2)$　$\psi(j_1+j_2-1, j_1+j_2-2)$ が求まる。

$\left\{\begin{array}{l} m_1 = J_1-2 \\ m_2 = J_2 \end{array}\right.$　$\left\{\begin{array}{l} m_1 = J_1-1 \\ m_2 = J_2-1 \end{array}\right.$　$\left\{\begin{array}{l} m_1 = J_1 \\ m_2 = J_2-2 \end{array}\right.$　の3組　２＋１＝３組

に対応する3組の φ, χ が含まれる。

$\varphi(j_1, j_1-2)$　$\varphi(j_1, j_1-1)$　$\varphi(j_1, j_1)$

$\chi(j_2, j_2-2)$　$\chi(j_2, j_2-1)$　$\chi(j_2, j_2)$

$m = m_1 + m_2 = J_1 + J_2 - 2$ でかつ $\psi(j_1+j_2, j_1+j_2-2)$　$\psi(j_1+j_2-1, j_1+j_2-2)$ に直交する

固有関数は $m = m_1 + m_2 = J_1 + J_2 - 2$ を最大値とする $\psi(j_1+j_2-2, j_1+j_2-2)$ が得られる

角運動量の合成(6)

一般に $m = m_1 + m_2 = J_1 + J_2 - k$ の時

$$\begin{cases} m_1 = J_1 - k \\ m_2 = J_2 \end{cases} \quad \begin{cases} m_1 = J_1 - k + 1 \\ m_2 = J_2 - 1 \end{cases} \quad \begin{cases} m_1 = J_1 - k + 2 \\ m_2 = J_2 - 2 \end{cases} \quad \begin{cases} m_1 = J_1 - k + 3 \\ m_2 = J_2 - 3 \end{cases} \quad \begin{cases} m_1 = J_1 \\ m_2 = J_2 - k \end{cases}$$

のK＋1組の組み合わせがある。

$J_1 \geq J_2 \quad k < 2J_2$ のときには

$J_- = J_x - iJ_y$ を作用させてmを1減らすごとに組み合わせは1つづつ増える。

$$\psi(j_1 + j_2, j_1 + j_2 - k - 1) \quad \psi(j_1 + j_2 - 1, j_1 + j_2 - k - 1) \quad \cdots\cdots \quad \psi(j_1 + j_2 - k, j_1 + j_2 - k - 1)$$

に全て直交する $\psi(j_1 + j_2 - k - 1, j_1 + j_2 - k - 1)$ が作られる。

$k = 2J_2$ のときは $\chi(j_2, j_2 - 2j_2) = \chi(j_2, -j_2)$ が現れてそれ以上mの値は減らせない。

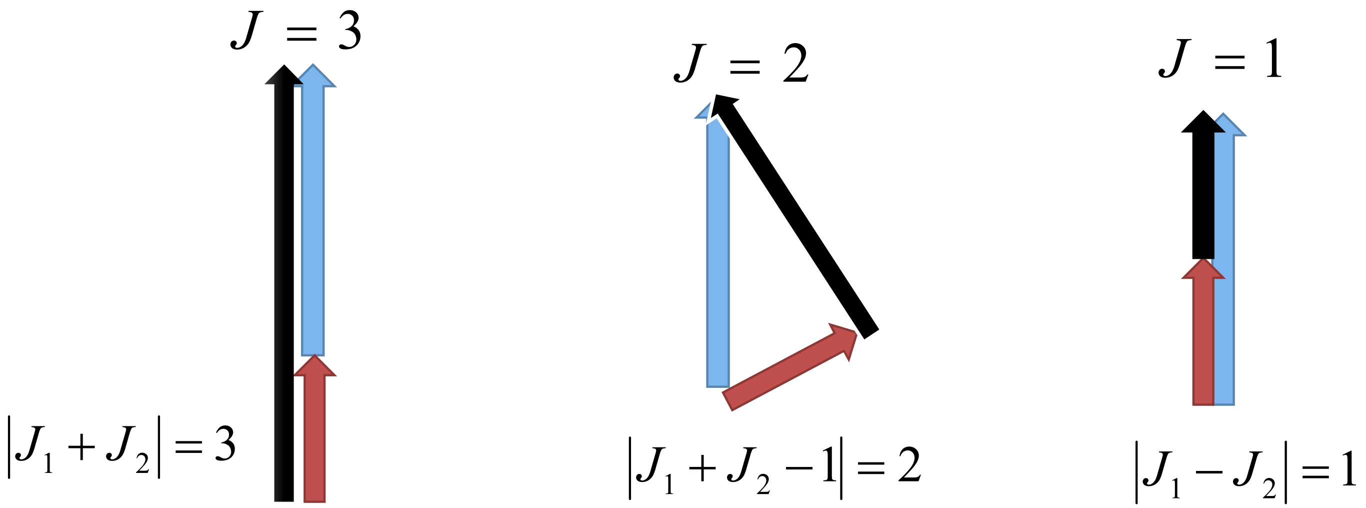
角運動量の合成(7)

これから先は、mを減らしても　J　の新しい値は出てこない。

J　の値は　$J_1+J_2, J_1+J_2-1, J_1+J_2-2, \cdots, J_1-J_2$　までである。

一般に　$J_1 \geq J_2$　の条件を除けば　$J_1+J_2, J_1+J_2-1, J_1+J_2-2, \cdots, |J_1-J_2|$　$2J_2+1$　個ある。

$\left.\begin{array}{l} J_1 = 1 \\ J_2 = 2 \end{array}\right\}$ の場合



スピン角運動量の合成（１）

$$J_1=\frac{1}{2}\quad J_2=\frac{1}{2}\qquad J_{\pm}\varphi(j,m)=\hbar\sqrt{(j\mp m)(j\pm m+1)}\varphi(j,m\pm 1)$$

$$\varphi_1(\frac{1}{2},\frac{1}{2})=\alpha_1\qquad \varphi_2(\frac{1}{2},\frac{1}{2})=\alpha_2\qquad J_-\varphi(\frac{1}{2},\frac{1}{2})=\hbar\sqrt{(\frac{1}{2}+\frac{1}{2})(\frac{1}{2}-\frac{1}{2}+1)}\varphi(\frac{1}{2},\frac{1}{2}-1)=\hbar\varphi(\frac{1}{2},-\frac{1}{2})$$

$$\varphi_1(\frac{1}{2},-\frac{1}{2})=\beta_1\quad \varphi_2(\frac{1}{2},-\frac{1}{2})=\beta_2\qquad J_+\varphi(\frac{1}{2},-\frac{1}{2})=\hbar\sqrt{(\frac{1}{2}+\frac{1}{2})(\frac{1}{2}-\frac{1}{2}+1)}\varphi(\frac{1}{2},\frac{1}{2})=\hbar\varphi(\frac{1}{2},\frac{1}{2})$$

$$J_{1-}\alpha_1=\hbar\beta_1\quad J_{1+}\beta_1=\hbar\alpha_1\quad J_{2-}\alpha_2=\hbar\beta_2\quad J_{2+}\beta_2=\hbar\alpha_2$$

$$\psi\left(\frac{1}{2}+\frac{1}{2},\frac{1}{2}+\frac{1}{2}\right)=\psi(1,1)=\varphi_1\left(\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right)\varphi_2\left(\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right)=\alpha_1\alpha_2\quad \cdots ①$$

$$J_-\psi(1,1)=\hbar\sqrt{(1+1)(1-1+1)}\psi(1,0)=\hbar\sqrt{2}\psi(1,0)=(J_{1-}+J_{2-})\alpha_1\alpha_2=J_{1-}\alpha_1\alpha_2+J_{2-}\alpha_1\alpha_2=\hbar\beta_1\alpha_2+\hbar\alpha_1\beta_2$$

$$\psi(1,0)=\frac{1}{\sqrt{2}}(\beta_1\alpha_2+\alpha_1\beta_2)\quad \cdots ②$$

$$J_-\psi(1,0)=\hbar\sqrt{(1+0)(1-0+1)}\psi(1,-1)=\sqrt{2}\hbar\psi(1,-1)=(J_{1-}+J_{2-})\frac{1}{\sqrt{2}}(\beta_1\alpha_2+\alpha_1\beta_2)=\frac{1}{\sqrt{2}}2\hbar\beta_1\beta_2$$

$$\psi(1,-1)=\beta_1\beta_2\qquad \psi(0,0)=\frac{1}{\sqrt{2}}(\beta_1\alpha_2-\alpha_1\beta_2)\quad \cdots ③$$

スピン角運動量の合成（２）

$$\psi(1,1) = \alpha_1\alpha_2 \quad \cdots ④$$

$$\psi(1,0) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\beta_1\alpha_2 + \alpha_1\beta_2\right) \quad \cdots ⑤$$

$$\psi(0,0) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\beta_1\alpha_2 - \alpha_1\beta_2\right) \quad \cdots ⑦$$

⑤と⑦はお互いに直交する

$$\psi(1,-1) = \beta_1\beta_2 \quad \cdots ⑥$$

$$\left.\begin{aligned}\psi^*(1,0)\psi(0,0) &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\beta_1^*\alpha_2^* + \alpha_1^*\beta_2^*\right)\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\beta_1\alpha_2 - \alpha_1\beta_2\right)\\ &= \frac{1}{2}\left(\beta_1^*\alpha_2^* + \alpha_1^*\beta_2^*\right)\left(\beta_1\alpha_2 - \alpha_1\beta_2\right)\\ &= \frac{1}{2}\left(\beta_1^*\beta_1\alpha_2^*\alpha_2 - \alpha_1^*\alpha_1\beta_2^*\beta_2 + \beta_2^*\beta_1\alpha_1^*\alpha_2 - \alpha_1\alpha_2^*\beta_2\beta_1^*\right) = \frac{1}{2}(1 - 1 + 0 - 0) = 0\end{aligned}\right\} \cdots ⑧$$

⑤と⑦はお互いに直交することを示している。