空間回転変換の代数構造とその表現

小桜 未来

2022 年 12 月 8 日

1　空間回転対称性

1.1　空間回転変換

　空間座標 x_i を

$$x_i \to x'_i = R_{ij}x_j$$

のように変換することを考える。このような変換のうち、ベクトルの内積を保つものを空間回転変換という。ベクトル形式で書き直せば

$$\boldsymbol{x} \to \boldsymbol{x}' = R\boldsymbol{x}$$

となる。内積を保つという要請から

$$(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) = (R\boldsymbol{x}, R\boldsymbol{y})$$

が成り立つ。これを行列形式で書き直せば、内積は $(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) = x_i y_i$ より

$$x_i y_i = R_{ij}x_j R_{ik}x_k = x_j R^T_{ji} R_{ik} x_k$$

となる。これは

$$R^T_{ji} R_{ik} = \delta_{jk}$$

であることを表している。ここから逆回転変換

$$R^{-1}_{ij} = R^T_{ij}$$

が存在することが分かる。

1.2　空間回転群

　空間回転変換は恒等変換

$$R_{ij} = \delta_{ij}$$

が存在する。また、

$$R^1_{ij} R^2_{jk} = (R^1 R^2)_{ik}$$

より、結合則

$$R^1_{ij}(R^2_{jk} R^3_{kl}) = (R^1_{ij} R^2_{jk}) R^3_{kl}$$

が成り立つ。そして、逆元

$$R_{ij}^{-1} = R_{ij}^{T} = R_{ji}$$

が存在する。以上より、回転変換は群となっていることが分かる。このような群を空間回転群という。

1.3　無限小空間回転変換

空間回転変換は連続群であることが分かっているので、無限小変換を繰り返すことで任意の空間回転変換を作り出すことができる。無限小変換は恒等変換からわずかにずれた変換と考えることができるので

$$R_{ij} = \delta_{ij} + \omega_{ij}$$

のように書くことができる。ここで、ω_{ij} は無限小のテンソルである。空間回転変換の条件

$$R_{ji}^{T} R_{ik} = \delta_{jk}$$

より、

$$(\delta_{ji}^{T} + \omega_{ji}^{T})(\delta_{ik} + \omega_{ik}) = \delta_{jk}$$

が成り立つ。二次の微小量を無視すると

$$\omega_{jk} + \omega_{jk}^{T} = 0$$

よって ω_{ij} は反対称テンソル

$$\omega_{ij} = -\omega_{ji}$$

でなければならない。また、

$$R_{ij}^{-1} = R_{ij}^{T}$$

より

$$\begin{aligned} R_{ij}^{-1} &= R_{ij}^{T} \\ &= \delta_{ji} + \omega_{ji} \\ &= \delta_{ij} - \omega_{ij} \\ &= (1 - \omega)_{ij} \end{aligned}$$

である。

1.4　空間回転変換のユニタリー表現

空間回転変換のユニタリー表現について考えよう。このユニタリー変換を $U(R)$ と書くことにすると、状態 Ψ は

$$\Psi \to \Psi' = U(R)\Psi$$

のように変換される。この変換により、物理量 A は

$$(\Psi_1, A\Psi_2) \to (U(R)\Psi_1, AU(R)\Psi_2) = (\Psi_1, U^{-1}(R)AU(R)\Psi_2)$$

となるので

$$A \to A' = U^{-1}(R)AU(R)$$

のように変換される。

1.5 空間回転変換のユニタリー群

空間回転変換のユニタリー表現は恒等変換

$$U(1) = 1$$

が存在する。また、

$$U(R^1)U(R^2) = U(R^1R^2)$$

より、結合則

$$U(R^1)(U(R^2)U(R^3)) = (U(R^1)U(R^2))U(R^3)$$

が成り立つ。そして、逆元

$$U^{-1}(R) = U(R^{-1})$$

が存在する。以上より、空間回転変換のユニタリー表現は群となっていることが分かる。このような群を空間回転群という。

1.6 無限小空間回転変換のユニタリー表現

無限小空間回転変換のユニタリー表現について考える。無限小空間回転変換に対応するユニタリー変換は

$$U(1+\omega) = 1 + \frac{i}{2}\omega_{ij}J_{ij}$$

と定義できる。[*1] ここで、J_{ij} のことを空間回転変換の生成子という。また、

$$\begin{aligned} U^{-1}(1+\omega) &= U(\{1+\omega\}^{-1}) \\ &= U(1-\omega) \\ &= 1 - \frac{i}{2}\omega_{ij}J_{ij} \end{aligned}$$

2 角運動量テンソル

2.1 角運動量テンソルとベクトルの交換関係

空間回転変換の生成子とベクトル V_j の交換関係を調べたい。これを調べるために

$$U^{-1}(1+\omega)V_iU(1+\omega) = (1+\omega)_{ij}V_j$$

を計算しよう。無限小空間回転変換のユニタリー表現の式を代入すると

$$\left(1 - \frac{i}{2}\omega_{kl}J_{kl}\right)V_j\left(1 + \frac{i}{2}\omega_{mn}J_{mn}\right) = (\delta_{jk} + \omega_{jk})V_k$$

二次の微小量を無視して展開すると

$$V_j + V_j\frac{i}{2}\omega_{mn}J_{mn} - \frac{i}{2}\omega_{kl}J_{kl}V_j = V_j + \omega_{jk}V_k$$

[*1] ここに $\frac{i}{2}$ が入っているのは J_{ij} を古典論における角運動量と対応させたいためだ。

添字を書き換え不要な項を除去し、交換関係を用いて書き直せば

$$\frac{i}{2}\omega_{mn}[V_j, J_{mn}] = \omega_{jk}V_k$$

ここで右辺の添字を m, n のみにできればさらに変形することができるので

$$\begin{aligned}\frac{i}{2}\omega_{mn}[V_j, J_{mn}] &= \omega_{jk}V_k \\ &= \frac{1}{2}(\omega_{jm}V_m + \omega_{jn}V_n) \\ &= \frac{1}{2}(-\omega_{mj}V_m + \omega_{jn}V_n) \\ &= \frac{1}{2}(-\delta_{jn}\omega_{mn}V_m + \delta_{jm}\omega_{mn}V_n) \\ &= \frac{1}{2}\omega_{mn}(-\delta_{jn}V_m + \delta_{jm}V_n)\end{aligned}$$

両辺を比較して

$$i[V_j, J_{mn}] = -\delta_{jn}V_m + \delta_{jm}V_n$$

となる。これが空間回転変換の生成子とベクトルの交換関係だ。

2.2 角運動量テンソル同士のテンソル性

空間回転変換の生成子のテンソル性を調べたい。この場合は

$$U^{-1}(R')U(1+\omega)U(R') = U(1 + {R'}^{-1}\omega R')$$

を計算する。無限小変換のユニタリー表現を代入すると

$$U^{-1}(R')(1 + \frac{i}{2}\omega_{ij}J_{ij})U(R') = 1 + \frac{i}{2}({R'}^{-1}\omega R')_{mn}J_{mn}$$

となる。不要な項を除去して展開すると

$$U^{-1}(R')(\omega_{ij}J_{ij})U(R') = {R'}^{-1}_{mi}\omega_{ij}{R'}_{jn}J_{mn}$$

ω_{ij} を除去して ${R'}^{-1}_{mi} = {R'}_{im}$ を用いれば

$$U^{-1}(R')J_{ij}U(R') = {R'}_{im}{R'}_{jn}J_{mn}$$

となる。これは

$${J'}_{mn} = {R'}_{im}{R'}_{jn}J_{mn}$$

より、J_{ij} がテンソルであることを表している。このため、J_{ij} は角運動量テンソルと呼ばれる。

2.3 角運動量テンソル同士の交換関係

先ほど導いた

$$U^{-1}(R')J_{ij}U(R') = {R'}_{im}{R'}_{jn}J_{mn}$$

を用いて角運動量テンソル同士の交換関係を調べたい。これは角運動量テンソルとベクトルの交換関係を調べたときと同様に $R' = 1 + \omega'$ とすればよい。つまり、

$$U^{-1}(1+\omega')J_{ij}U(1+\omega') = (1+\omega')_{im}(1+\omega')_{jn}J_{mn}$$

を計算すればよい。無限小空間回転変換のユニタリー表現の式を代入すると

$$\left(1 - \frac{i}{2}{\omega'}_{kl}J_{kl}\right)J_{ij}\left(1 + \frac{i}{2}{\omega'}_{st}J_{st}\right) = (\delta_{im} + \omega'_{im})(\delta_{jn} + {\omega'}_{jn})J_{mn}$$

二次の微小量を無視して展開すると

$$J_{ij} + J_{ij}\frac{i}{2}{\omega'}_{st}J_{st} - \frac{i}{2}{\omega'}_{kl}J_{kl}J_{ij} = J_{ij} + {\omega'}_{im}J_{mj} + {\omega'}_{jn}J_{in}$$

添字を書き換え不要な項を除去し、交換関係を用いて書き直せば

$$\frac{i}{2}{\omega'}_{kl}[J_{ij}, J_{kl}] = {\omega'}_{im}J_{mj} + {\omega'}_{jn}J_{in}$$

ここで右辺の添字を k,l のみにできればさらに変形することができるので

$$\begin{aligned}
\frac{i}{2}{\omega'}_{kl}[J_{ij}, J_{kl}] &= {\omega'}_{im}J_{mj} + {\omega'}_{jn}J_{in} \\
&= \frac{1}{2}({\omega'}_{ik}J_{kj} + {\omega'}_{il}J_{lj} + {\omega'}_{jk}J_{ik} + {\omega'}_{jl}J_{il}) \\
&= \frac{1}{2}(-{\omega'}_{ki}J_{kj} + {\omega'}_{il}J_{lj} - {\omega'}_{kj}J_{ik} + {\omega'}_{jl}J_{il}) \\
&= \frac{1}{2}(-{\omega'}_{kl}\delta_{il}J_{kj} + {\omega'}_{kl}\delta_{ik}J_{lj} - {\omega'}_{kl}\delta_{lj}J_{ik} + {\omega'}_{kl}\delta_{kj}J_{il}) \\
&= \frac{1}{2}{\omega'}_{kl}(-\delta_{il}J_{kj} + \delta_{ik}J_{lj} - \delta_{lj}J_{ik} + \delta_{kj}J_{il})
\end{aligned}$$

両辺を比較して

$$i[J_{ij}, J_{kl}] = -\delta_{il}J_{kj} + \delta_{ik}J_{lj} - \delta_{lj}J_{ik} + \delta_{kj}J_{il}$$

となる。これが角運動量テンソル同士の交換関係である。

3　角運動量ベクトル

3.1　角運動量ベクトルへの変換

ここまで角運動量を反対称テンソルとして扱ってきたが、一般に三次元反対称テンソルは三次元ベクトルに変換することができる。これを角運動量ベクトルという。角運動量ベクトルは

$$J_k = \frac{1}{2}\varepsilon_{ijk}J_{ij}$$

と定義するのが自然だ。両辺に ε_{mnk} をかけると

$$\begin{aligned}
\varepsilon_{mnk}J_k &= \frac{1}{2}\varepsilon_{mnk}\varepsilon_{ijk}J_{ij} \\
&= \frac{1}{2}(\delta_{mi}\delta_{nj} - \delta_{mj}\delta_{ni})J_{ij} \\
&= \frac{1}{2}(J_{mn} - J_{nm}) \\
&= J_{mn}
\end{aligned}$$

より、

$$J_{ij} = \varepsilon_{ijk} J_k$$

となる。角運動量テンソルを行列表示すると

$$J_{ij} = \begin{pmatrix} 0 & J_3 & -J_2 \\ -J_3 & 0 & J_1 \\ J_2 & -J_1 & 0 \end{pmatrix}$$

となる。ここで係数が出ないために定義に $\frac{1}{2}$ が含まれていた。

3.2　角運動量ベクトルとベクトルの交換関係

先ほどの変換を用いて

$$i[V_j, J_{mn}] = -\delta_{jn} V_m + \delta_{jm} V_n$$

を角運動量ベクトルで書き直したい。両辺に $\frac{1}{2}\varepsilon_{mnk}$ をかけると

$$\begin{aligned} i[V_j, J_k] &= \frac{i}{2}\varepsilon_{mnk}[V_j, J_{mn}] \\ &= \frac{1}{2}\varepsilon_{mnk}(-\delta_{jn} V_m + \delta_{jm} V_n) \\ &= \frac{1}{2}(-\varepsilon_{mjk} V_m + \varepsilon_{jnk} V_n) \\ &= \varepsilon_{jnk} V_n \\ &= -\varepsilon_{jkn} V_n \end{aligned}$$

より

$$[V_i, J_j] = i\varepsilon_{ijk} V_k$$

3.3　角運動量ベクトル同士の交換関係

同様に

$$i[J_{ij}, J_{kl}] = -\delta_{il} J_{kj} + \delta_{ik} J_{lj} - \delta_{lj} J_{ik} + \delta_{kj} J_{il}$$

を角運動量ベクトルで書き直したい。$\frac{1}{4}\varepsilon_{ijm}\varepsilon_{kln}$ をかけると

$$
\begin{aligned}
i[J_m, J_n] &= \frac{i}{4}\varepsilon_{ijm}\varepsilon_{kln}[J_{ij}, J_{kl}] \\
&= \frac{1}{4}\varepsilon_{ijm}\varepsilon_{kln}(-\delta_{il}J_{kj} + \delta_{ik}J_{lj} - \delta_{lj}J_{ik} + \delta_{kj}J_{il}) \\
&= \frac{1}{4}(-\varepsilon_{ijm}\varepsilon_{kin}J_{kj} + \varepsilon_{ijm}\varepsilon_{iln}J_{lj} - \varepsilon_{ijm}\varepsilon_{kjn}J_{ik} + \varepsilon_{ijm}\varepsilon_{jln}J_{il}) \\
&= \frac{1}{4}(\varepsilon_{kni}\varepsilon_{jmi}J_{kj} + \varepsilon_{lni}\varepsilon_{jmi}J_{lj} - \varepsilon_{imj}\varepsilon_{knj}J_{ik} - \varepsilon_{imj}\varepsilon_{lnj}J_{il}) \\
&= \frac{1}{2}(\varepsilon_{kni}\varepsilon_{jmi}J_{kj} - \varepsilon_{imj}\varepsilon_{knj}J_{ik}) \\
&= \frac{1}{2}(\varepsilon_{kni}\varepsilon_{jmi}J_{kj} - \varepsilon_{kmi}\varepsilon_{jni}J_{kj}) \\
&= \frac{1}{2}(\varepsilon_{kni}\varepsilon_{jmi}J_{kj} - \varepsilon_{kmi}\varepsilon_{jni}J_{kj}) \\
&= \frac{1}{2}((\delta_{kj}\delta_{nm} - \delta_{km}\delta_{nj})J_{kj} - (\delta_{kj}\delta_{mn} - \delta_{kn}\delta_{mj})J_{kj}) \\
&= \frac{1}{2}(-J_{mn} + J_{nm}) \\
&= -J_{mn} \\
&= -\varepsilon_{mnk}J_k
\end{aligned}
$$

より

$$[J_i, J_j] = i\varepsilon_{ijk}J_k$$

4　角運動量ベクトル代数の表現

4.1　昇降演算子の定義

あるエルミート演算子 N に対して c を正の実数としたとき、

$$[N, X] = cX$$

が成り立つ演算子 X を N に対する上昇演算子という。また、上の関係式のエルミート共役を取ると

$$
\begin{aligned}
[N, X]^\dagger &= (NX)^\dagger - (XN)^\dagger \\
&= X^\dagger N^\dagger - N^\dagger X^\dagger \\
&= -(N^\dagger X^\dagger - X^\dagger N^\dagger) \\
&= -[N^\dagger, X^\dagger] \\
&= -[N, X^\dagger]
\end{aligned}
$$

より

$$[N, X^\dagger] = -cX^\dagger$$

が成り立つ。このような演算子 $X^\dagger$ を N に対する下降演算子という。また、上昇演算子と下降演算子は係数の正負しか違いがないので、これらを合わせて昇降演算子という。

4.2　昇降演算子の由来

N の固有値を n、固有状態を $|n\rangle$ とすると、

$$N|n\rangle = n|n\rangle$$

が成り立つ。ここで、状態 $X|n\rangle$ の N に対する固有値を考える。これは

$$\begin{aligned} NX|n\rangle &= XN|n\rangle + cX|n\rangle \\ &= Xn|n\rangle + cX|n\rangle \\ &= (n+c)X|n\rangle \end{aligned}$$

より

$$N(X|n\rangle) = (n+c)(X|n\rangle)$$

である。よって、上昇演算子は N の固有値を増やすことが分かる。同様に

$$\begin{aligned} NX^\dagger|n\rangle &= X^\dagger N|n\rangle - cX^\dagger|n\rangle \\ &= X^\dagger n|n\rangle - cX^\dagger|n\rangle \\ &= (n-c)X^\dagger|n\rangle \end{aligned}$$

より

$$N(X^\dagger|n\rangle) = (n-c)(X^\dagger|n\rangle)$$

である。よって、下降演算子は N の固有値を減らすことが分かる。これらが、上昇演算子と下降演算子の名前の由来だ。

4.3　角運動量ベクトルの昇降演算子

角運動量ベクトルについて昇降演算子を考えたい。角運動量ベクトル $\boldsymbol{J}$ と N はエルミートなので、a_i を実数として

$$N = a_i J_i$$

と書けるだろう。また、昇降演算子は b_i を複素数として

$$X = b_i J_i$$

と書ける。これらが交換関係

$$[N, X] = cX$$

を満たすので、代入すると

$$[a_i J_i, b_j J_j] = c b_k J_k$$

となる。係数を外に出すと

$$a_i b_j [J_i, J_j] = c b_k J_k$$

となり、角運動量ベクトルの交換関係

$$[J_i, J_j] = i\varepsilon_{ijk} J_k$$

より

$$ia_i b_j \varepsilon_{ijk} = cb_k$$

となる。ここで

$$b_j = b_j^R + ib_j^I$$

と分解すると

$$ia_i(b_j^R + ib_j^I)\varepsilon_{ijk} = c(b_k^R + ib_k^I)$$

となる。展開すると

$$ia_i b_j^R \varepsilon_{ijk} - a_i b_j^I \varepsilon_{ijk} = cb_k^R + icb_k^I$$

実成分と虚成分を分けると

$$\begin{cases} a_i b_j^R \varepsilon_{ijk} & = cb_k^I \\ -a_i b_j^I \varepsilon_{ijk} & = cb_k^R \end{cases}$$

展開すると

$$\begin{cases} a_2 b_3^R - a_3 b_2^R & = cb_1^I \\ a_3 b_1^R - a_1 b_3^R & = cb_2^I \\ a_1 b_2^R - a_2 b_1^R & = cb_3^I \end{cases} \begin{cases} a_2 b_3^I - a_3 b_2^I & = -cb_1^R \\ a_3 b_1^I - a_1 b_3^I & = -cb_2^R \\ a_1 b_2^I - a_2 b_1^I & = -cb_3^R \end{cases}$$

ここで、簡単のために

$$a_i = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

と置こう。[*2]実際に代入すると

$$\begin{cases} -b_2^R & = cb_1^I \\ b_1^R & = cb_2^I \\ 0 & = cb_3^I \end{cases} \begin{cases} -b_2^I & = -cb_1^R \\ b_1^I & = -cb_2^R \\ 0 & = -cb_3^R \end{cases}$$

ここで左の第一式と右の第二式を用いて $c = \pm 1$ となる。前提条件より $c > 0$ なので、$c = 1$ であることが分かる。よって z を任意の複素数とすると $X = z(J_1 + iJ_2)$ の形であればいずれも上昇演算子となる。ここでは簡単のため $z = 1$ とすると[*3]

$$X = J_1 + iJ_2$$

となる。これが上昇演算子である。また、

$$X^\dagger = J_1 - iJ_2$$

が下降演算子となる。昇降演算子はまとめて $J_1 \pm iJ_2$ と表せる。上昇演算子を J_+、下降演算子を J_- とすると

$$J_\pm = J_1 \pm iJ_2$$

と表せる。

[*2] これは (J_1, J_2, J_3) という基底ベクトルを J_3 を固定して、それを軸に回転させるような基底の変換を行うことに等しい。
[*3] 本来であれば規格化のために $1/\sqrt{2}$ とするべきだが、不要な係数が付くだけなのでここでは 1 とする。

4.4 $\boldsymbol{J}^2$ と J_3 の交換関係

$\boldsymbol{J}^2$ と J_3 の交換関係を求める。

$$
\begin{aligned}
[\boldsymbol{J}^2, J_3] &= [J_1^2 + J_2^2 + J_3^2, J_3] \\
&= [J_1^2 + J_2^2, J_3] \\
&= [J_1^2, J_3] + [J_2^2, J_3] \\
&= J_1^2 J_3 - J_3 J_1 + J_2^2 J_3 - J_3 J_2^2 \\
&= J_1^2 J_3 - J_1 J_3 J_1 + J_1 J_3 J_1 - J_3 J_1^2 + J_2^2 J_3 - J_2 J_3 J_2 + J_2 J_3 J_2 - J_3 J_2^2 \\
&= J_1 [J_1, J_3] + [J_1, J_3] J_1 + J_2 [J_2, J_3] + [J_2, J_3] J_2 \\
&= -J_1 [J_3, J_1] - [J_3, J_1] J_1 + J_2 [J_2, J_3] + [J_2, J_3] J_2 \\
&= -iJ_1 J_2 - iJ_2 J_1 + iJ_2 J_1 + iJ_1 J_2 \\
&= 0
\end{aligned}
$$

よって、$\boldsymbol{J}^2$ と J_3 は可換で、同時対角化可能である。つまり、Ψ は $\boldsymbol{J}^2$ と J_3 の両方の固有ベクトルと選べる。

4.5 $\boldsymbol{J}^2$ と $J_\pm$ の交換関係

$\boldsymbol{J}^2$ と $J_\pm$ の交換関係を求める。

$$
\begin{aligned}
[\boldsymbol{J}^2, J_\pm] =& [\boldsymbol{J}^2, J_1 \pm iJ_2] \\
=& [\boldsymbol{J}^2, J_1] \pm i[\boldsymbol{J}^2, J_2] \\
=& [J_1^2 + J_2^2 + J_3^2, J_1] \pm i[J_1^2 + J_2^2 + J_3^2, J_2] \\
=& [J_2^2 + J_3^2, J_1] \pm i[J_1^2 + J_3^2, J_2] \\
=& [J_2^2, J_1] + [J_3^2, J_1] \pm i[J_1^2, J_2] \pm i[J_3^2, J_2] \\
=& J_2[J_2, J_1] + [J_2, J_1]J_2 + J_3[J_3, J_1] + [J_3, J_1]J_3 \\
& \pm iJ_1[J_1, J_2] \pm i[J_1, J_2]J_1 \pm iJ_3[J_3, J_2] \pm i[J_3, J_2]J_3 \\
=& -J_2[J_1, J_2] - [J_1, J_2]J_2 + J_3[J_3, J_1] + [J_3, J_1]J_3 \\
& \pm iJ_1[J_1, J_2] \pm i[J_1, J_2]J_1 \mp iJ_3[J_2, J_3] \mp i[J_2, J_3]J_3 \\
=& -iJ_2J_3 - iJ_3J_2 + iJ_3J_2 + iJ_2J_3 \mp J_1J_3 \mp J_3J_1 \pm J_3J_1 \pm J_1J_3 \\
=& 0
\end{aligned}
$$

よって、$\boldsymbol{J}^2$ と $J_\pm$ は可換で、昇降演算子で結ばれるすべての状態ベクトルの $\boldsymbol{J}^2$ に対する固有値は同じである。

4.6 J_3 の固有値の上限と下限

J_3 の固有値を m すると

$$
\begin{aligned}
J_3 \Psi^m &= m \Psi^m \\
J_3 J_\pm \Psi^m &= (m \pm 1) J_\pm \Psi^m
\end{aligned}
$$

と表せる。J_3 の固有値には上限と下限が存在する。なぜなら、

$$
(\Psi, (\boldsymbol{J}^2 - J_3^2)\Psi) = (\Psi, (J_1^2 + J_2^2)\Psi) \geq 0
$$

より

$$(\Psi, \boldsymbol{J}^2\Psi) \geq (\Psi, J_3^2\Psi)$$

であり、$\boldsymbol{J}^2$ の固有値は有限な角運動量の二乗だからである。J_3 の固有値の最大値を j、最小値を j' とすると

$$J_+\Psi^j = 0$$
$$J_-\Psi^{j'} = 0$$

が成り立つ。ここで $j - j'$ は自然数である。また、

$$J_-J_+\Psi^j = 0$$
$$J_+J_-\Psi^{j'} = 0$$

が成り立つので、演算子部分を展開すると

$$\begin{aligned}
J_-J_+ &= (J_1 - iJ_2)(J_1 + iJ_2) \\
&= J_1^2 + J_2^2 + i[J_1, J_2] \\
&= \boldsymbol{J}^2 - J_3^2 - J_3 \\
J_+J_- &= (J_1 + iJ_2)(J_1 - iJ_2) \\
&= J_1^2 + J_2^2 - i[J_1, J_2] \\
&= \boldsymbol{J}^2 - J_3^2 + J_3
\end{aligned}$$

よって

$$\boldsymbol{J}^2\Psi^j = (J_3^2 + J_3)\Psi^j = j(j+1)\Psi^j$$
$$\boldsymbol{J}^2\Psi^{j'} = (J_3^2 - J_3)\Psi^{j'} = j'(j'-1)\Psi^{j'}$$

先の議論で昇降演算子で結ばれるすべての状態ベクトルの $\boldsymbol{J}^2$ に対する固有値は同じであることが分かっているので

$$j(j+1) = j'(j'-1)$$

が成り立つ。$j - j'$ は自然数より n を自然数として $j - j' = n$ とすると $j' = j - n$ より

$$\begin{aligned}
&j(j+1) = (j-n)(j-n-1) \\
\Leftrightarrow &j^2 + j = (j-n)^2 - (j-n) \\
\Leftrightarrow &j^2 + j = j^2 - 2nj + n^2 - j + n \\
\Leftrightarrow &2nj + 2j = n^2 + n \\
\Leftrightarrow &2j(n+1) = n(n+1) \\
\Leftrightarrow &j = \frac{n}{2}
\end{aligned}$$

よって

$$\begin{cases} j = \frac{n}{2} \\ j' = -\frac{n}{2} \end{cases}$$

となり、J_3 の固有値は整数 (n が偶数の場合) か半整数 (n が奇数の場合) のいずれかであることがわかる。

4.7　角運動量ベクトル代数の表現

以上の議論から、J_3 の固有値は $-j$ 以上 j 以下の $2j+1$ 個の整数または半整数を取ることが分かる。この値を m としよう。このようなときの状態を Ψ_j^m と書くことにすると

$$\begin{aligned} J_3\Psi_j^m &= m\Psi_j^m \\ \boldsymbol{J}^2\Psi_j^m &= j(j+1)\Psi_j^m \end{aligned}$$

が成り立つ。ここで

$$J_3(J_\pm\Psi_j^m) = (m\pm 1)(J_\pm\Psi_j^m)$$

より

$$J_\pm\Psi_j^m = \alpha^\pm(j,m)\Psi_j^{m\pm 1}$$

と表せる。ここで規格化条件

$$(\Psi_j^{m'}, \Psi_j^m) = \delta_{m'm}$$

を課すと

$$\begin{aligned} |\alpha^\pm(j,m)|^2 &= (\alpha^\pm(j,m)\Psi_j^m, \alpha^\pm(j,m)\Psi_j^m) \\ &= (J_\pm\Psi_j^m, J_\pm\Psi_j^m) \\ &= (\Psi_j^m, J_\mp J_\pm\Psi_j^m) \\ &= (\Psi_j^m, (\boldsymbol{J}^2 - J_3^2 \mp J_3)\Psi_j^m) \\ &= (\Psi_j^m, (j(j+1) - m^2 \mp m)\Psi_j^m) \\ &= (j(j+1) - m^2 \mp m) \end{aligned}$$

となり、位相を調整して α を実数だとすると

$$\alpha^\pm(j,m) = \sqrt{j(j+1) - m^2 \mp m}$$

となる。まとめると

$$\begin{aligned} J_3\Psi_j^m &= m\Psi_j^m \\ (J_1 \pm iJ_2)\Psi_j^m &= \sqrt{j(j+1) - m^2 \mp m}\Psi_j^{m\pm 1} \end{aligned}$$

となる。これが角運動量ベクトル代数の表現だ。

4.8　スピン 1/2

$j = \frac{1}{2}$ のときについて考えよう。この場合、$m = \pm\frac{1}{2}$ を取りえる。表現は

$$\begin{aligned} J_3\Psi_{1/2}^{\pm 1/2} &= \pm\frac{1}{2}\Psi_{1/2}^{\pm 1/2} \\ (J_1 \pm iJ_2)\Psi_{1/2}^{\mp 1/2} &= \sqrt{\frac{1}{2}\cdot\frac{3}{2} - \left(\mp\frac{1}{2}\right)^2 + \frac{1}{2}}\Psi_{1/2}^{\mp 1/2 \pm 1} \\ &= \Psi_{1/2}^{\pm 1/2} \\ (J_1 \pm iJ_2)\Psi_{1/2}^{\pm 1/2} &= J_\pm\Psi_{1/2}^{\pm 1/2} \\ &= 0 \end{aligned}$$

となる。まとめると

$$
\begin{aligned}
J_3\Psi_{1/2}^{\pm 1/2} &= \pm\frac{1}{2}\Psi_{1/2}^{\pm 1/2} \\
(J_1 \mp iJ_2)\Psi_{1/2}^{\pm 1/2} &= \Psi_{1/2}^{\mp 1/2} \\
(J_1 \pm iJ_2)\Psi_{1/2}^{\pm 1/2} &= 0
\end{aligned}
$$

となる。J_1, J_2, J_3 について解くと

$$
\begin{aligned}
J_1\Psi_{1/2}^{\pm 1/2} &= \frac{1}{2}\Psi_{1/2}^{\mp 1/2} \\
J_2\Psi_{1/2}^{\pm 1/2} &= \pm\frac{i}{2}\Psi_{1/2}^{\mp 1/2} \\
J_3\Psi_{1/2}^{\pm 1/2} &= \pm\frac{1}{2}\Psi_{1/2}^{\pm 1/2}
\end{aligned}
$$

これは第 1 成分を $+1/2$、第 2 成分を $-1/2$ として次のようにまとめることができる。

$$
\begin{aligned}
(\Psi_{1/2}^{m}, \boldsymbol{J}\Psi_{1/2}^{m'}) &= \frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}_{mm'} \\
\sigma_1 &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \\
\sigma_2 &= \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \\
\sigma_3 &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}
\end{aligned}
$$

この $\boldsymbol{\sigma}$ をパウリ行列という。これがスピン 1/2 の角運動量ベクトル代数の表現だ。$\boldsymbol{J}$ の表現を $D(\boldsymbol{J})$ と書くことにすると

$$
D(\boldsymbol{J}) = \frac{\boldsymbol{\sigma}}{2}
$$

となる。