Approach to Angular Momentum through Quantum Mechanical Consideration

Donald Carl J. Choi

平成 22 年 3 月 22 日

目 次

第1章　Angular Momentum

1.1 Classical motion in a central field

古典軌道角運動量の定義

$$\boldsymbol{L} \equiv \boldsymbol{r} \times \boldsymbol{p}$$

但し、$\boldsymbol{r}$ はある時刻での粒子 (質量 m) への位置ベクトル、$\boldsymbol{p}$ は併進運動量である。$\boldsymbol{r}$ と $\boldsymbol{p}$ は軌道で張られる平面をなす。角運動量はその平面に垂直である。もし、$\boldsymbol{r}$ の最先端で動いている質点に働く力が中心力なら、m の角運動量は保存される。

中心力場を古典論にて議論しよう。その骨格としてハミルトン形式の解析力学を採用しよう。ハミルトニアンは次のようである。

$$H = \frac{1}{2m}\boldsymbol{p}^2 + V(r) \tag{1.1}$$

$\mid \boldsymbol{L} \mid = r \cdot p_{vertical}$ から、$\boldsymbol{p}^2 = {p_r}^2 + r^{-2}\boldsymbol{L}^2$ と書ける。これを (1.1) 式に反映すると、

$$H = \frac{1}{2m}{p_r}^2 + \frac{\boldsymbol{L}^2}{2mr^2} + V(r). \tag{1.2}$$

This expression shows that the radial part of the motion can be regarded as taking place in one dimension in a central field where the "effective potential energy" is

$$V_{eff} = \frac{\boldsymbol{L}^2}{2mr^2} + V(r). \tag{1.3}$$

The first term is called the *centrifugal energy.* Expressing $\dot{\theta}$ in terms of $\mid \boldsymbol{L} \mid$ from

$$\mid \boldsymbol{L} \mid = mr^2\dot{\theta} = \text{constant}$$

and substituting in the expression for the energy, we obtain

$$t = \int_r \frac{m\,dr}{\sqrt{2m[E - V(r)] - \frac{\boldsymbol{L}^2}{r^2}}} + (\text{const.}) \tag{1.4}$$

and

$$\theta = \int_r \frac{\frac{\boldsymbol{L}}{r^2}\,dr}{\sqrt{2m[E - V(r)] - \frac{\boldsymbol{L}^2}{r^2}}} + (\text{const.}). \tag{1.5}$$

1.2 Commutators of Angular Momentum

まず、ここで、任意の物理量の演算子の**期待値**は、古典的物理量そのものに対応するということを喚起させていただきたい(このような考え方はエーレンフェストの定理や量子論の古典極限の議論につながる)。このような考え方で、量子論的軌道角運動量を次のように記述するのは自然である。次は、その定義である。

$$\hat{\boldsymbol{L}} \equiv \hat{\boldsymbol{r}} \times \hat{\boldsymbol{p}}$$

演算子の間にベクトル外積演算が使われているが、一応ベクトルの場合と同じように成分ごと (Cartesian co-ordinates) に分けて扱えばいい。

$$\begin{aligned} \hat{L}_x &= \hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y \\ \hat{L}_y &= \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z \\ \hat{L}_z &= \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x \end{aligned} \tag{1.6}$$

(1.7) の正準交換関係 (Canonical Commutation Relation) により、(1.6) の全ての座標演算子と運動量演算子は可換である。

$$[\hat{x}^i,\ \hat{p}_j] = i\hbar\delta^i{}_j \tag{1.7}$$

$$(\text{c.f. } \{x^i,\ p_j\} = \delta^i{}_j)$$

比較のためにポワソン括弧を併記した。この関係を用いた簡単な計算で、次を得る。

$$\begin{aligned} [\hat{L}_x,\ \hat{L}_y] &= i\hbar\hat{L}_z \\ [\hat{L}_y,\ \hat{L}_z] &= i\hbar\hat{L}_x \\ [\hat{L}_z,\ \hat{L}_x] &= i\hbar\hat{L}_y \end{aligned} \tag{1.8}$$

(1.8) は角運動量の交換関係である。Cyclic な置換により他が得られる、数学的にも美しい関係である。実はこれが、量子論的角運動量の実質的な定義である。もちろん、既存の定義は、軌道角運動量流の角運動量に関しては問題なく動くだろうが、ただ、この体系だと固有値の条件として整数のみを要求するので、半整数で記述されるような角運動量 (スピンなど) への議論の展開には不適切なのである。しかし、半整数な固有値を持つスピン角運動量も、上記の交換関係には従うし、実際交換関係だけを持っても固有値と固有状態を論理的に構成することができるので、交換関係が量子論的角運動量の実質的な定義とみなされるようになったのだ。

Re-definition of Angular Momentum - Commutation Relation

$$[\hat{L}_\alpha,\ \hat{L}_\beta] \equiv i\hbar\epsilon_{\alpha\beta\gamma}\hat{L}_\gamma$$

where $\epsilon_{\alpha\beta\gamma}$ is the Levi-Civita symbol.

ここでそもそも "$i\hbar$ "が気になる。次節で扱うが、ポワソン括弧はこの交換関係と相当関わる。解析力学は古典理論ではあるが、まさに美しい体系を持っていると評させていただきたい。

$$[\hat{L}_\alpha,\ \hat{\boldsymbol{L}}^2] = 0 \qquad (\alpha = x, y, z) \tag{1.9}$$

(1.9) はもうひとつの大事な意味を含蓄している。角運動量の自乗とそれぞれ成分が可換となっているが、これはその二つの物理量が**同時測定可能**であるということを意味する。詳しくは次節で探求することにしよう。

次にいくつかの性質を述べておこう。これらは一般的な角運動量の性質を現しているので流石に大事である。熟知していていただきたい。

$$\begin{aligned} \hat{L}_+ &= \hat{L}_x + i\hat{L}_y \\ \hat{L}_- &= \hat{L}_x - i\hat{L}_y \end{aligned} \tag{1.10}$$

$$[\hat{L}^2,\ \hat{L}_\pm] = 0 \tag{1.11}$$

$$[\hat{L}_z,\ \hat{L}_\pm] = \pm\hbar\hat{L}_\pm \tag{1.12}$$

$$[\hat{L}_+,\ \hat{L}_-] = \pm 2\hbar\hat{L}_z \tag{1.13}$$

1.3 Simultaneous Eigenvalue Problem

1.3.1 On components of Angular Momentum

同時固有値問題　2 つ以上の演算子に共通な固有ベクトルを求める問題

次の方程式の組からはじめよう。

$$\begin{aligned} \hat{L}_x u_{\alpha\beta\gamma} &= \alpha u_{\alpha\beta\gamma} \\ \hat{L}_y u_{\alpha\beta\gamma} &= \beta u_{\alpha\beta\gamma} \\ \hat{L}_z u_{\alpha\beta\gamma} &= \gamma u_{\alpha\beta\gamma} \end{aligned} \tag{1.14}$$

簡単な計算で $[\hat{L}_x,\ \hat{L}_y]u_{\alpha\beta\gamma} = 0$ を得る。一方、(1.8) を用いると、

$$i\hbar\hat{L}_z u_{\alpha\beta\gamma} = i\hbar\gamma u_{\alpha\beta\gamma}$$

なので $\gamma = 0$ となる。さらに、$\alpha = \beta = 0$ である。同時固有値が 2 つある場合でも、同じ結果を得る。つまり、角運動量の成分の同時固有値問題は、解があるとしても次のような 1 組の固有値しか持たない。

$$\alpha = \beta = \gamma = 0 \tag{1.15}$$

1.3.2 Compatibility

(1) Theorem of compatibility

proposition 01)　任意の演算子の組が互いに可換なら、その組は共立する。

pf)　一般性を保つ任意の線形演算子 $\hat{A}, \hat{B}$ に対して、次のような条件を満たす全ての固有関数 $u_{\mu\nu}$ が**完全系をなす**と仮定しよう (共立性の定義)。

$$\hat{A}u_{\mu\nu} = \mu u_{\mu\nu}$$
$$\hat{B}u_{\mu\nu} = \nu u_{\mu\nu}$$

同時固有関数の性質より $[\hat{A},\ \hat{B}]u_{\mu\nu} = 0$ であり、これの重ね合わせも等式をなす。定義より、$\{u_{\mu\nu}\}$ は任意の関数を張る。その任意の関数を $\psi = \sum_{\mu\nu} \gamma_{\mu\nu} u_{\mu\nu}$ とすると、

$$[\hat{A},\ \hat{B}]\psi = 0. \tag{1.16}$$

ゆえに、

$$[\hat{A},\ \hat{B}] = 0 \tag{1.17}$$

であり、$\hat{A}$ と $\hat{B}$ は可換である。3 つ以上の演算子の場合でも同じ方法で証明できる。

$(q.\ e.\ d.)$

(2) Poisson brackets

しばらく古典理論の話をしよう。これは量子力学の基盤を固める話なので大事である。相変わらずハミルトン形式を採用しよう。その基本骨格は次のようである。

The Canonical Equations and Hamiltonian

$$\dot{q}^i = \frac{\partial H}{\partial p_i}$$
$$\dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q^i}$$
$$H = p_i \dot{q}^i - L$$

任意の物理量 (Observable) $O(q,\ p,\ t)$ の total time derivative を検討しよう。

$$\frac{dO}{dt} = \frac{\partial O}{\partial q}\frac{dq}{dt} + \frac{\partial O}{\partial p}\frac{dp}{dt} + \frac{\partial O}{\partial t} \tag{1.18}$$

With the aid of canonical equation, (1.18) を少し変形すると、

$$\frac{dO}{dt} = \frac{\partial O}{\partial q}\frac{\partial H}{\partial p} - \frac{\partial O}{\partial p}\frac{\partial H}{\partial q} + \frac{\partial O}{\partial t} \tag{1.19}$$

となる。ここで、次のような表現を定義する。

$$\{A,\ B\} = \frac{\partial A}{\partial q^i}\frac{\partial B}{\partial p_i} - \frac{\partial A}{\partial p_i}\frac{\partial B}{\partial q^i} \tag{1.20}$$

これを (1.19) に適用すると、

$$\frac{dO}{dt} = \{O,\ H\} + \frac{\partial O}{\partial t} \tag{1.21}$$

となる。(1.20) はポワソン括弧と呼ぶ。少し後で出るが (1.21) は重要な意味を持つ。ここでテンソルを 1 つ定義しよう。これは 2 系反対称テンソルである。

$$\epsilon_{\alpha\beta} = \begin{cases} 1 & (\alpha,\ \beta) = (1,\ 2) \\ -1 & (\alpha,\ \beta) = (2,\ 1) \\ 0 & (\text{the others}) \end{cases}$$

これを用いると、(1.20) のポワソン括弧はもっと簡潔に書ける。

$$\{A,\ B\} = \epsilon_{\alpha\beta}\frac{\partial A}{\partial {x_i}^{\alpha}}\frac{\partial B}{\partial {x_i}^{\beta}} \tag{1.22}$$

但し、

$${x_i}^{\alpha} = \begin{cases} q^i & \alpha = 1 \\ p_i & \alpha = 2. \end{cases}$$

特に (1.21) は、任意の物理量の時間発展を表す方程式で、**運動方程式**そのものにほかならないことがわかる。ある物理量 A が動的変数を持っているのに、運動する際にずっと一定な値を保つのなら (a function of the dynamical variables which remain constant during the motion of the system)、A のことは運動の定数 (an integral of motion) と定義される。これを運動方程式 (1.21) に反映してみよう。

$$\frac{dA}{dt} = 0 \quad \Longrightarrow \quad \{A,\ H\} + \frac{\partial A}{\partial t} = 0 \tag{1.23}$$

(1.23) はリウヴィル方程式 (Liouville equation) への議論に繋がるが、説明すべくものが相当増えるので、一応ここでは扱わないことにしよう。

物理量 A が時間に明示的に (explicitly) 依存しないなら ($\partial_t A = 0$)、次を満たす。

$$\frac{dA}{dt} = 0 \ \wedge \ \frac{\partial A}{\partial t} = 0 \quad \Longrightarrow \quad \{A,\ H\} = 0 \tag{1.24}$$

また、簡単な計算でも得られる、次のような面白い関係も紹介する。

$$\dot{q} = \{q,\ H\}, \qquad \dot{p} = \{p,\ H\} \tag{1.25}$$

次はヤコビ恒等式 (Jacobi's identity) である。

$$\{f,\ \{g,\ h\}\} + \{g,\ \{h,\ f\}\} + \{h,\ \{f,\ g\}\} = 0 \tag{1.26}$$

(1.27) はヤコビ恒等式と矛盾しない。

$$\{\{g,\ h\},\ f\} = \{g,\ \{h,\ f\}\} - \{h,\ \{g,\ f\}\} \tag{1.27}$$

これ以外にも議論したいことが余ってあるが、今は角運動量を**量子力学的に**探求するのが目標であって、古典理論を踏襲するのではないので、解析力学に関してはこれ以上掘り下げなくても十分であろう。

1.3.3 Conservation of angular momentum in a central field

(1) A re-analysis of *conservation of quantity*

さて、量子力学の話に戻ろう。任意の物理量 (演算子)$\hat{A}$ が保存量だという意味は、$\hat{A}$ がハイゼンベルク抽象において時間独立であるという意味でもある。これは

$$e^{\frac{i}{\hbar}t\hat{H}}\hat{A}e^{-\frac{i}{\hbar}t\hat{H}} = \hat{A}\ (\ = \hat{A}_H(t)\ ) \tag{1.28}$$

とも書ける。つまり、$\hat{A}$ とハミルトニアン $\hat{H}$ が可換である。それは、前に証明した **proposition 01** より、$\hat{A}$ と $\hat{H}$ が共立するというのを意味するのでもある。

ここからは前節で扱った正準方程式やポワソン括弧などの知識もどんどん活用していこう。共立性の定理により、(1.28) は次のようにも書ける。

$$[\hat{A},\ \hat{H}] = 0$$

$\hat{A}$ がハミルトニアンと共立するのを見せることで、物理量が保存するというのを証明できるのである。これはポワソン括弧の性質でもあった。(1.24) をもう 1 回確認してもらいたい。

これは勿論、軌道角運動量の場合にも適用できる。L_x で例えてみよう。

$$\begin{aligned}
[\hat{L}_x,\ \hat{x}^2] &= [\hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y,\ \hat{x}^2] \\
[\hat{L}_x,\ \hat{y}^2] &= [\hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y,\ \hat{y}^2] \\
[\hat{L}_x,\ \hat{z}^2] &= [\hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y,\ \hat{z}^2]
\end{aligned}$$

簡単な計算で、1 番目は 0、2 番目は $2i\hbar\hat{z}\hat{y}$、3 番目は $-2i\hbar\hat{y}\hat{z}$ なのがわかるので、$[\hat{L}_x,\ \hat{r}^2]$ となる。したがって、$\hat{L}_x$ が $\hat{r}^2$ と共立するのがわかる。さらに、交換関係の性質により、これは $\hat{r}$ とも可換であり、進んで $\hat{r}$ のどんな関数とも可換であるから、

中心力ポテンシャル $V(\hat{r})$ とも共立する。これが $\hat{\boldsymbol{L}}$ の他の成分にまで拡張できるのは容易にわかる。$\hat{\boldsymbol{L}}$ と運動エネルギーとの関係も同様に示せる。したがって、角運動量 $\hat{\boldsymbol{L}}$ は中心力ポテンシャルによるハミルトニアンと可換である。つまり、$\hat{\boldsymbol{L}}$ は中心力における運動ではベクトルとして成分ごとに保存される。

(1.30) はハイゼンベルクの運動方程式である。

$$\hat{x}_H(t) = e^{\frac{i}{\hbar}t\hat{H}}\hat{x}e^{-\frac{i}{\hbar}t\hat{H}} \tag{1.29}$$

$$i\hbar\frac{d}{dt}\hat{x}_H(t) = [\hat{x}_H(t),\ \hat{H}] \tag{1.30}$$

(1.29) のように、時間発展のユニタリ演算子とその逆演算子のペアが両翼にかけられているような演算子をハイゼンベルク表示での演算子と呼ぶ。通常的に、その両翼のユニタリ演算子のペアはシュレディンガー方程式の形式解となっている。但しその条件として、**ハミルトニアンが時間に明示的に依存しないこと**を要求する。ハイゼンベルクの運動方程式は、座標演算子だけでなく、他の物理量にも適用できる。ハミルトニアンが時間に明示的に依存しないのを条件として、任意の物理量 (observable) に関する運動方程式は次のように書ける。

$$\frac{d}{dt}\hat{O}_H(t) = \frac{1}{i\hbar}[\hat{O}_H(t),\ \hat{H}] \tag{1.31}$$

ここで、一瞬だけ古典論に戻って、(1.21) を持ち出そう。相変わらず、物理量が時間に明示的に依存しない ($\partial_t O = 0$) という条件をつける。すると

$$\frac{d}{dt}O = \{O,\ H\} \tag{1.32}$$

これは、まさに驚嘆に値する対応関係だ。実は、交換関係の古典極限がポワソン括弧だというのがもう知られている。それは、$\hbar$ をそのものとして扱うか、事実上のゼロとして扱うかの問題に帰着する。前者は微視的に (量子論的マインド)、後者は巨視的に (古典論的マインド) 世界を眺めようとしているのである。

物理学の方程式はいつも適用限界を持つ (もし T.O.E. が確立されたらそれだけは該当しないかもしれないが)。微視世界と巨視世界をそれぞれ物理学的に論じる際に共有できるような尺度は、残念ながら今までは見つかっていない。

$$\hbar = 1.054\ 571\ 596 \pm 0.000\ 000\ 082 \times 10^{-34}\ [\mathrm{J\cdot s}]$$
$$h = 6.626\ 068\ 76 \pm 0.000\ 000\ 52 \times 10^{-34}\quad [\mathrm{J\cdot s}]$$

これは微視世界の基本尺度、プランク定数である。量子論が見事に効くスケールの世界で、$\hbar$(もしくは $i\hbar$) は決して無視できない、ちゃんとした大きさを持つ単位量である。しかし、顕微鏡の倍率をだんだん落としていくと、”量子化格子 ”もそれ

に伴ってだんだん不明確に見えていくはずである。やがて顕微鏡のレンズの倍率が日常スケールに辿り着くと、量子化なんかは気にしなくてもいいようになる。そのスケールではどうせ $\hbar$ を 0 そのものとみなしたほうが懸命であろう。

量子力学の古典極限は様々な場合に有用であるし、学究的にも相当楽しさを呼び起こす。特に、量子論と古典論の対応を論じるとき、エーレンフェストの定理はいつもその中心にある。

量子力学の胎動に解析力学が決定的な役割を演じたのには、疑いの余地がない。ハミルトン、ポワソン、ヤコビ、ラグランジュたちによって行われた先駆的な研究のおかげで、この複雑な力学体系が矛盾なく無事に建てられて今日に至るのである。彼らに敬意を表ざるを得ない。彼らの行った力学体系の再解析こそ、これからでも再評価されなければならない。

1.4 the square of the angular momentum and its z-component

本節では、前節で述べたように、角運動量の交換関係だけを持っても固有値と固有関数を再構成できるというのを示す。基本的に (1.8) から (1.13) までの交換関係を用いる。但し、次のような演算子を導入して使うことにしよう。

$$\hat{J}_\alpha = \frac{1}{\hbar}\hat{L}_\alpha \tag{1.33}$$

参考文献

1. 猪木慶治、川合　光：量子力学 I (講談社, 2007)
2. 江沢　洋：量子力学 (II) (裳華房, 2002)
3. 矢花一浩：量子力学 (LaTeX, 2007)
4. 初貝安弘：解析力学 (LaTeX, 2007)
5. Charles F. Stevens (著), 早田 次郎 (訳)：
   現代物理を学ぶための理論物理学 (吉岡書店, 2002)
6. L. D. Landau and E.M. Lifshitz:
   Mechanics (Course of Theoretical Physics) (Butterworth Heinemann, 2005)