

軌道角運動量

● 昇降演算子 (角運動量)

✓ 交換関係

<<角運動量演算子について>>

$$\mathbf{L}^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2 \quad L_{\pm} = L_x \pm iL_y : \text{昇降演算子 (+が昇, -が降)}$$

✓ 角運動量

$$\mathbf{L} = (L_x, L_y, L_z)$$

Ex>

 これらは互いに交換しない

$$[L_x, L_y] \varphi = (L_x L_y - L_y L_x) \varphi$$

$$= -\hbar^2 \left[\left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right) - \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right) \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) \right] \varphi$$

$$= y \frac{\partial}{\partial x} + yz \frac{\partial^2}{\partial z \partial x} - z^2 \frac{\partial^2}{\partial y \partial x} - yx \frac{\partial^2}{\partial z^2} + zx \frac{\partial^2}{\partial y \partial z} - \left(zy \frac{\partial^2}{\partial x \partial z} - z^2 \frac{\partial^2}{\partial x \partial y} - xy \frac{\partial^2}{\partial z^2} + x \frac{\partial}{\partial y} + xz \frac{\partial^2}{\partial z \partial y} \right)$$

$$= y \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial y}$$

$$\therefore [L_x, L_y] \varphi = -\hbar^2 \left(y \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial y} \right) \varphi = -\hbar^2 \frac{L_z}{i\hbar} \varphi = i\hbar L_z \varphi$$

$$\therefore [L_x, L_y] = (L_x L_y - L_y L_x) = i\hbar L_z \quad \text{同様に } [L_y, L_z] = i\hbar L_x, [L_z, L_x] = i\hbar L_y$$

- ✓ これらの演算子を用いて、次の関係が成立する

$$[L^2, L_x] = [L^2, L_y] = [L^2, L_z] = 0 \quad \text{Report② : 交換関係の証明}$$

$$[L_z, L_{\pm}] = \pm \hbar L_{\pm}$$

$$L^2 = L_+ L_- + L_z^2 - \hbar L_z = L_- L_+ + L_z^2 + \hbar L_z$$

- ◆ 同時固有状態について

=定理= A, B, Cという演算子が次の交換関係を満たしている。 $[A, B] = C$

ある状態 φ が、Aに対してもBに対しても固有関数である場合、つまり....

$$A\varphi = a\varphi \quad B\varphi = b\varphi \quad (a, b \text{ は固有値 : 定数})$$

であるとき、 $C\varphi = 0$ でなければならぬ。

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

$$Ab\varphi - Ba\varphi = b(A\varphi) - a(B\varphi) = ba\varphi - ab\varphi = c\varphi$$

$$\therefore ba\varphi - ab\varphi = c\varphi = 0 \quad c\varphi = 0$$

$[A, B] = 0$ の場合、AとBは共通の固有関数をもつ。 (同時固有状態)

状態の決定

● 状態の決定

$[L^2, L_z] = 0$: より L^2 と L_z に対する固有状態が存在する. (同時固有状態)

→ L^2 と L_z の固有値が λ, m であり, その固有関数を $\varphi(\lambda, m)$ とする.

$$\begin{cases} L^2 \varphi(\lambda, m) = \lambda \varphi(\lambda, m) \\ L_z \varphi(\lambda, m) = m \varphi(\lambda, m) \end{cases}$$

I) $L^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2$ より $L^2 - L_z^2 = L_x^2 + L_y^2$

∴ $(L - L_z^2)\varphi(\lambda, m) = (L_x^2 + L_y^2)\varphi(\lambda, m)$

握手 $(\lambda - m^2)\varphi(\lambda, m) = (L_x^2 + L_y^2)\varphi(\lambda, m)$

両辺に $\varphi^*(\lambda, m)$ を掛けて全空間で積分すると..

$$(\lambda - m^2) \int \varphi^*(\lambda, m) \varphi(\lambda, m) d\mathbf{r} = \int \underline{\varphi^*(\lambda, m) (L_x^2 + L_y^2) \varphi(\lambda, m)} d\mathbf{r}$$

ここで.. $\int \varphi^* L_x^2 \varphi d\mathbf{r} = \int \varphi^* L_x L_x \varphi d\mathbf{r} = \int (L_x \varphi)^\dagger (L_x \varphi) d\mathbf{r} \geq 0$

∴ $\lambda \geq m^2$ λ が決まっているとき, m の値には上限がある.

状態の決定

エルミート演算子

$$\int f^*(Og)dx = \int (O^\dagger f)^* g dx$$

$O = O^\dagger$: O はエルミート演算子

II) $[L_z, L_{\pm}] = \pm \hbar L_{\pm}$ より $L_z L_{\pm} - L_{\pm} L_z = \pm \hbar L_{\pm}$

$$L_z L_+ = L_+ L_z + \hbar L_+ \quad \text{右から} \varphi(\lambda, m) \text{を掛けて..}$$

$$L_z \{L_+ \varphi(\lambda, m)\} = L_+ \underline{L_z \varphi(\lambda, m)} + \hbar L_+ \varphi(\lambda, m)$$

$\hookrightarrow m \varphi(\lambda, m)$

$$\therefore L_z \{L_+ \varphi(\lambda, m)\} = (m + \hbar) \{L_+ \varphi(\lambda, m)\}$$

この結果から, $L_+ \varphi(\lambda, m)$ という関数は $m + \hbar$ という固有値をもつ L_z の固有関数であることを意味する。

つまり, $L_+ \varphi(\lambda, m) \propto \varphi(\lambda, m + \hbar)$

状態の決定

エルミート共役

行と列を入れ替えて（置換）複素共役をとる操作

行列： $A = (a_{ij})$ に対して $A^\dagger = (a_{ji}^*)$

II) $[L_z, L_\pm] = \pm \hbar L_\pm$ より $L_z L_\pm - L_\pm L_z = \pm \hbar L_\pm$

$L_z L_+ = L_+ L_z + \hbar L_+$ 右から $\varphi(\lambda, m)$ を掛けて..

$$L_z \{L_+ \varphi(\lambda, m)\} = L_+ \frac{L_z \varphi(\lambda, m)}{} + \hbar L_+ \varphi(\lambda, m)$$

 $m \varphi(\lambda, m)$

$$\therefore L_z \{L_+ \varphi(\lambda, m)\} = (m + \hbar) \{L_+ \varphi(\lambda, m)\}$$

この結果から, $L_+ \varphi(\lambda, m)$ という関数は $m + \hbar$ という固有値をもつ L_z の固有関数であることを意味する。

つまり, $L_+ \varphi(\lambda, m) \propto \varphi(\lambda, m + \hbar)$

状態の決定

エルミート演算子

$$\int f^*(Og)dx = \int (O^\dagger f)^* g dx$$

$O = O^\dagger$: O はエルミート演算子

II) $[L_z, L_\pm] = \pm \hbar L_\pm$ より $L_z L_\pm - L_\pm L_z = \pm \hbar L_\pm$

同様に,

$$L_z L_- = L_- L_z - \hbar L_- \quad \text{右から} \varphi(\lambda, m) \text{を掛けて..}$$

$$L_z \{L_- \varphi(\lambda, m)\} = L_- \underline{L_z \varphi(\lambda, m)} - \hbar L_- \varphi(\lambda, m)$$


 $m \varphi(\lambda, m)$

$$\therefore L_z \{L_- \varphi(\lambda, m)\} = (m - \hbar) \{L_- \varphi(\lambda, m)\}$$

この結果から, $L_- \varphi(\lambda, m)$ という関数は $m - \hbar$ という固有値をもつ L_z の固有関数であることを意味する。

つまり, $L_- \varphi(\lambda, m) \propto \varphi(\lambda, m - \hbar)$

状態の決定

$\lambda \geq m^2$ λ が決まっているとき, m の値には上限がある.

III) m には最大値 m_{max} があるので (II) の条件より

$$L_+ \varphi(\lambda, m_{max}) = 0$$

同様に m には最大値 m_{min} があるので (II) の条件より

$$L_- \varphi(\lambda, m_{min}) = 0$$

また, 最大値と最小値は m を \hbar ずつ変える昇降演算子を使って結びついている.

☞ $m_{max} - m_{min} = \hbar(2l)$ ($2l$ は 0 以上の整数)

$$m_{max} = |m_{min}|$$

$m_{max} = m$ とすると

$$m_{max} - m_{min} = m - (-m) = 2m$$

$L_+ \varphi(\lambda, m_{max}) = 0$ 左から L_- を掛けて..

$$\frac{L_- L_+ \varphi(\lambda, m_{max}) = 0}{\therefore (L^2 - L_z^2 - \hbar L_z) \varphi(\lambda, m_{max}) = 0}$$

$$\hookrightarrow L_- L_+ = L^2 - L_z^2 - \hbar L_z$$

$$(\lambda - m_{max}^2 - \hbar m_{max}) \varphi(\lambda, m_{max}) = 0$$

状態の決定

$\lambda \geq m^2$ λ が決まっているとき, m の値には上限がある.

III) m には最大値 m_{max} があるので (II) の条件より

$$L_+ \varphi(\lambda, m_{max}) = 0$$

同様に m には最大値 m_{min} があるので (II) の条件より

$$L_- \varphi(\lambda, m_{min}) = 0$$

また, 最大値と最小値は m を \hbar ずつ変える昇降演算子を使って結びついている.

☞ $m_{max} - m_{min} = \hbar(2l)$ $(2l$ は 0 以上の整数)

同様に,

$$m_{max} = |m_{min}|$$

$m_{max} = m$ とすると

$$m_{max} - m_{min} = m - (-m) = 2m$$

$L_- \varphi(\lambda, m_{min}) = 0$ 左から L_+ を掛けて..

$$\frac{L_+ L_- \varphi(\lambda, m_{min}) = 0}{\therefore (L^2 - L_z^2 + \hbar L_z) \varphi(\lambda, m_{min}) = 0}$$

$$\hookrightarrow L_+ L_- = L^2 - L_z^2 + \hbar L_z$$

$$(\lambda - m_{min}^2 + \hbar m_{min}) \varphi(\lambda, m_{min}) = 0$$

状態の決定

以上より、

$$\lambda - m_{max}^2 - \hbar m_{max} = 0$$

$$\lambda - m_{min}^2 + \hbar m_{min} = 0$$

辺々を引いて λ を消去すると..

$$(m_{max} + m_{min})(m_{max} - m_{min} - \hbar) = 0$$

ここで.. $m_{max} - m_{min} = \hbar(2l)$ より

$$m_{max} = -m_{min} \rightarrow \begin{cases} m_{max} = \hbar l \\ m_{min} = -\hbar l \end{cases}$$

よって
$$\begin{aligned} \lambda &= m_{max}^2 + \hbar m_{max} \\ &= m_{min}^2 - \hbar m_{min} \end{aligned} \Bigg\} = \hbar^2 l(l+1)$$

∴
$$\lambda = \hbar^2 l(l+1), \quad m = \hbar l, \hbar(l-1), \dots -\hbar(l-1), -\hbar l$$