

1 角運動量*1

○ 角運動量は、ベクトル $\hat{\mathbf{l}}$ で、量子力学 I では、微分演算子として定義した。

$$\hat{l}_x = \frac{\hbar}{i} \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) = i\hbar \left(\sin \phi \frac{\partial}{\partial \theta} + \cot \theta \cos \phi \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \quad (1)$$

$$\hat{l}_y = \frac{\hbar}{i} \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right) = i\hbar \left(-\cos \phi \frac{\partial}{\partial \theta} + \cot \theta \sin \phi \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \quad (2)$$

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

$$\hat{\mathbf{l}}^2 = \hat{l}_x^2 + \hat{l}_y^2 + \hat{l}_z^2 \quad (4)$$

ここで、 x, y, z は粒子の座標 θ, ϕ は極座標を表す。また、 i は虚数単位、 \hbar はプランク定数を 2π で割ったもの。

○ 固有値、固有関数

$\hat{\mathbf{l}}^2$ と \hat{l}_z は、交換可能なので、同時固有関数を持つ。その固有関数は名前がついていて、

$$Y_l^m(\theta, \phi) : \text{球面調和関数} \quad (5)$$

添え字 l と m は、固有値と関係している。つまり、

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{l}}^2 Y_l^m(\theta, \phi) &= \hbar^2 l(l+1) Y_l^m(\theta, \phi) \\ \hat{l}_z Y_l^m(\theta, \phi) &= \hbar m Y_l^m(\theta, \phi) \end{aligned} \quad (6)$$

○ 縮退度

$Y_l^m(\theta, \phi)$ は、2つの整数の組 (l, m) で指定される。

$$l = 0, 1, 2, \dots \quad (7)$$

$$-l \leq m \leq l \quad (8)$$

*1 量子力学 I 講義ノート No. 4 P2-P10 を参照のこと。

したがって、 m は、 $(2l + 1)$ 個の値を取る。例えば、 $l = 1$ のとき、 $m = -1, 0, 1$ で、 m は3つ。

\hat{l}^2 の固有値は、 l だけで決まって、 m によらない。 $Y_l^m(\theta, \phi)$ と $Y_l^{m'}(\theta, \phi)$ は、同じ固有値 $l(l + 1)$ を与える。 m は $(2l + 1)$ 個の値をとるので、

$$\boxed{\hat{l}^2 \text{ の固有値は } (2l + 1) \text{ 個に縮退している}}$$

○ 質量 m の1個の粒子の中心力ポテンシャル $V(r)$ での運動: ハミルトニアンは、

$$H = \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(r) = \frac{1}{2m} \left[\left(\frac{\hbar}{i} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right)^2 + \frac{\hat{l}^2}{r^2} \right] + V(r) \quad (9)$$

と書けるから、 $I = mr^2$ とすると、

$$H_{\text{rot}} = \frac{\hat{l}^2}{2I} \quad (10)$$

は回転の部分のハミルトニアンと考える事が出来る。その固有値 ϵ_l は、

$$\epsilon_l = \frac{\hbar^2}{2I} l(l + 1) \quad (11)$$

また、エネルギーの縮退は、 \hat{l}^2 の固有値の縮退と同じ。したがって、

$$(2l + 1) \text{ 個に縮退} \quad (12)$$

2 スピン*2

○スピンは内部自由度と言われる。

古典力学では1つの粒子の状態は位置ベクトル $\mathbf{r} = (x, y, z)$ と運動量ベクトル $\mathbf{p} = (p_x, p_y, p_z)$ で表される。これは、1粒子の自由度は位置とその運動量しかない事を示している。

ところが、量子力学では、位置やその運動量だけでは説明できない実験事実がある。そこで、新しい自由度として、スピン自由度が導入された。スピン自由度は3つの成分を持ったベクトルとして観測される。つまり、量子力学では

1つの粒子の自由度として、位置(運動量)とスピンの2つを考えなければならない。

*2 量子力学 II 参照。

この事から波動関数は、位置の自由度だけでなく、スピンも引数に含めなければならない。したがって、統計力学において状態数や分配関数の計算に考える必要がある。

○スピンの性質

スピンは物理量なので、量子力学では演算子となる。これを $\hat{\mathbf{S}} = (\hat{S}_x, \hat{S}_y, \hat{S}_z)$ と書き、その固有関数を $v(s_z)$ とする。スピンの固有関数は、位置の関数では無い。

1. 角運動量 \hat{l} と同じ数学的構造: $\hat{\mathbf{S}}$ は物理量なので、演算子だから、

$$\hat{l}^2 Y_l^m(\theta, \phi) = \hbar^2 l(l+1) Y_l^m(\theta, \phi) \quad (13)$$

$$\hat{l}_z Y_l^m(\theta, \phi) = \hbar m Y_l^m(\theta, \phi) \quad \text{ただし、} -l \leq m \leq l \quad (14)$$

↓

$$\hat{\mathbf{S}}^2 v(s_z) = \hbar^2 s(s+1) v(s_z) \quad (15)$$

$$\hat{S}_z v(s_z) = \hbar s_z v(s_z) \quad \text{ただし、} -s \leq s_z \leq s \quad (16)$$

スピンの固有関数 $v(s_z)$ は一般には $\hat{\mathbf{S}}^2$ と \hat{S}_z の固有値 s と s_z の関数だが、ここでは、 s は省略して s_z の関数として書く。また、(16) 式から、スピンも $2s+1$ 個に縮退していることがわかる。

2. 古典的な類推ができない。

角運動量—古典的な自由度 θ, ϕ : (1)~(3) 式

↓

スピンにはこういう対応は無い。古典的な自由度は対応しない。

○通常1つの粒子は s の値を1つしかとらない。

角運動量 例えば1つの電子は $l = 0, 1, 2, \dots$ どれでもとれる。

↓

スピン 電子 1/2、中性子 1/2、陽子 (水素原子の核) 1/2 — フェルミ粒子
光子 1、重水素の原子核 1 (スピンの合成) — ボース粒子

○ ハミルトニアンに $\hat{\mathbf{S}}$ が含まれていない時、

→ エネルギー固有状態は、 $(2s+1)$ 個に縮退する。

したがって、状態密度もその分増える。これは、今まで内部自由度と呼んでいた。内部状態の数 g は、

$$g = 2s + 1 \quad (17)$$

特に電子は、 $s = 1/2$ だから $g = 2$ となる。

宿題 (7月5日提出: 第3回小テストの資格範囲注意*3)

1. 異核2原子分子1個の分配関数が $Z_1 = Z_G j_{rot} Z_S$ の時、1分子あたりの比熱が $C_V = C_{V,G} + C_{V,rot} + C_{V,S}$ と3つの比熱の和になることを示しなさい。特に分子の慣性モーメントが I とすると、 $C_{V,rot}$ について低温の極限で温度 T の依存性を表す式を求めなさい。添字の G, rot, S は重心、回転、スピンを表す。また、 $x \ll 1$ で $\ln(1+x) \simeq x$ を使え。
2. 異核2原子分子の j_{rot} について、温度が低ければ大きい l は無視できることを示せ。

*3 6月21日および28日出題の宿題のどちらかを出していないと第3回の小テストは受験できません。