

## 1 角運動量<sup>\*1</sup>

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

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

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

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

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

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

固有値、固有関数

$\hat{l}^2$  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、

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

縮退度

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

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

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

<sup>\*1</sup> 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、

$\hat{l}^2$  の固有値は  $(2l + 1)$  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  $\epsilon_l$  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  $\hat{S} = (\hat{S}_x, \hat{S}_y, \hat{S}_z)$  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:  $\hat{S}$  は物理量なので、演算子だから、

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

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

↓

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

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

スピンの固有関数  $v(s_z)$  は一般には  $\hat{S}^2$  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  $\theta, \phi$ : (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  $\hat{S}$  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

1. 周期的な境界条件で光子の  $D(\omega)$  と  $E$  を求めなさい。
2. フォノンや光子の化学ポテンシャルが 0 であることを熱力学の自由エネルギー最小原理 (岩波基礎物理学シリーズ 7 「統計力学」、長岡洋介 著、岩波書店 P83) から導け。