2015 年度統計力学 II 授業ノート 2

角運動量とスピン

2015.7.2 担当 吉森 明

1 角運動量

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

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

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

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

$$\hat{\boldsymbol{l}}^2 = \hat{l}_x^2 + \hat{l}_y^2 + \hat{l}_z^2 \tag{4}$$

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

$\hat{\boldsymbol{l}}^2$ 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、

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

添え字 l と m は、固有値と関係している。つまり、

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

○ 縮退度

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

$$l = 0, 1, 2, \ldots \tag{7}$$

$$-l \leq m \leq l \tag{8}$$

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。

$\hat{\boldsymbol{l}}^2$ 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、

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

○ 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、

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

と書けるから、$I = mr^2$ とすると、

$$H_{\mathrm{rot}} = \frac{\hat{\boldsymbol{l}}^2}{2I} \tag{10}$$

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、

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

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

$$(2l+1) \text{ 個に縮退} \tag{12}$$

2 スピン[*1]

○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。

[*1] 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 $\hat{\boldsymbol{l}}$ と同じ数学的構造: $\hat{\mathbf{S}}$ は物理量なので、演算子だから、

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

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

$$\updownarrow$$

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

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

   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

   $\updownarrow$

   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 $l = 0, 1, 2, \ldots$ どれでもとれる。	
	$\updownarrow$	
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、

$\longrightarrow$ 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、

$$g = 2s + 1 \tag{17}$$

特に電子は、$s=1/2$ だから $g=2$ となる。

宿題

1. (a) 周期的な境界条件で光子の $D(\omega)$ と E を求めなさい。
   (b) 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 $C_V = C_{V,G} + C_{V,rot} + C_{V,S}$ となることを示しなさい。添字の G, rot, S は重心、回転、スピンを表す。
   (c) 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。$x << 1$ で $\ln(1+x) \simeq x$ を使い、$\ell > 1$ は無視して良い。
2. 異核 2 原子分子の j_{rot} について、低温で大きい ℓ は無視できることを示せ。