

角運動量演算子

最初に角運動量演算子の一般的な話をして、後半で軌道角運動量の話を簡単にしています。

プラケットで行いますが、波動関数でも同じです。

煩わしいので演算子のハットを外して書いています。基本的には、大文字のローマ文字は演算子、それ以外は通常の数としています（位置演算子と運動量演算子は小文字ですが x, p とし、 $C_{j,m}^\pm$ は大文字ですが通常の数にしています）。

角運動量の交換関係から固有状態と固有値を求めていきますが、初めて量子力学をやる人は斜め読みして、とつと結果と軌道角運動量のところに行っていいです。というより、角運動量の話は読み物として触れる程度にして（話だけなら分かりやすい）、必要になってからちゃんと勉強する方が効率的です。特に物理向けの群論の話を少し勉強してから改めて触れたほうが見通しがいいですし、実用上も群論の視点からの方がいい気がします。

ここでは群論の話には触れずに、交換関係から導けるものとして扱っていきます。まず、エルミート演算子 J_1, J_2, J_3 を用意します。エルミート演算子なので、

$$J_1 = J_1^\dagger, \quad J_2 = J_2^\dagger, \quad J_3 = J_3^\dagger$$

となっています。そして、この 3 個の演算子だけで成立している交換関係として

$$[J_1, J_2] = i\hbar J_3, \quad [J_3, J_1] = i\hbar J_2, \quad [J_2, J_3] = i\hbar J_1$$

を満たすとします。これらはレビィ・チビタ記号 ϵ_{abc} （小文字のローマ文字の添え字は 1, 2, 3）を使えば

$$[J_a, J_b] = i\hbar \epsilon_{abc} J_c$$

とまとめて書けます。レビィ・チビタ記号は $\epsilon_{123} = +1$ として、1, 2, 3 の偶置換ではプラス、奇置換ではマイナスになります。例えば

$$\epsilon_{312} = \epsilon_{231} = +1, \quad \epsilon_{132} = \epsilon_{213} = -1$$

ということです。交換関係の記号を使わないなら、3 次元ベクトルの外積によって

$$\mathbf{J} \times \mathbf{J} = i\hbar \mathbf{J} \quad (\mathbf{J} = (J_1, J_2, J_3))$$

とも書けます。

というわけで、交換関係を満たすエルミート演算子 J_1, J_2, J_3 について見ていきます。まず、 J_1, J_2, J_3 は 3 成分のベクトルに対応しているように見えるので、ベクトルの大きさのように

$$\mathbf{J}^2 = J_1^2 + J_2^2 + J_3^2$$

という演算子 \mathbf{J}^2 を作ります。 \mathbf{J}^2 と J_1 との交換関係は

$$\begin{aligned} [\mathbf{J}^2, J_1] &= [J_1^2 + J_2^2 + J_3^2, J_1] \\ &= [J_1^2, J_1] + [J_2^2, J_1] + [J_3^2, J_1] \\ &= J_2[J_2, J_1] + [J_2, J_1]J_2 + J_3[J_3, J_1] + [J_3, J_1]J_3 \\ &= -i\hbar J_2 J_3 - i\hbar J_3 J_2 + i\hbar J_3 J_2 + i\hbar J_2 J_3 \\ &= 0 \end{aligned}$$

途中で

$$[A, B \pm C] = [A, B] \pm [A, C], [A, BC] = B[A, C] + [A, B]C$$

となっていることをっています。 J_2, J_3 でも同じなので

$$[\mathbf{J}^2, J_1] = 0, [\mathbf{J}^2, J_2] = 0, [\mathbf{J}^2, J_3] = 0$$

となり、 \mathbf{J}^2 は J_a と交換するのが分かります。交換することから、 \mathbf{J}^2 と J_a は同時固有状態を持つことが分かります。ただし注意がある、例えば J_a を J_3 と選んで

$$[\mathbf{J}^2, J_3] = 0$$

としたとき、 \mathbf{J}^2 と J_3 の同時固有状態 $|\phi\rangle$ は存在しますが、 \mathbf{J}^2 と $J_{1,2}$ の同時固有状態は一般的には存在しません。理由は簡単で J_3 と $J_{1,2}$ は交換しないからです。交換しないなら J_3 と $J_{1,2}$ の同時固有状態は存在しないので、 \mathbf{J}^2 と $J_{1,2}$ の同時固有状態も存在しないことになります。こういった理由から、ここからは J_3 が \mathbf{J}^2 と交換するとして、 J_3 を特別扱いしていきます (J_3 を選ぶ理由は慣習だからというだけです)。ここから同時固有状態と言った時は、 \mathbf{J}^2 と J_3 の同時固有状態をさします。

同時固有状態を $|\phi\rangle$ として、これは規格化 $\langle\phi|\phi\rangle = 1$ されてます (エルミート演算子の固有状態は正規直交関係を持つ)。ここから同時固有状態 $|\phi\rangle$ に対する

$$\mathbf{J}^2|\phi\rangle = \lambda|\phi\rangle, J_3|\phi\rangle = \rho|\phi\rangle$$

これらの固有値 λ, ρ を求めます。まず、簡単な次元解析をします。 J_a の交換関係を見ると、 $J_a J_b$ と $\hbar J_c$ の次元が合っている必要があるので、 J_a は \hbar と同じ次元を持っています。このことから λ, ρ を

$$\mathbf{J}^2|\phi\rangle = \hbar^2 \lambda|\phi\rangle, J_3|\phi\rangle = \hbar \rho|\phi\rangle$$

と与えなおして、 λ, ρ は無次元量とします。

内積の性質から固有値に制限が入ります。 J_a がエルミート演算子なので、その固有値は実数であることを使います。固有値が実数なので、エルミート演算子 A による $\langle\psi|A|\psi\rangle$ (期待値) は、エルミート演算子の定義から

$$\langle\psi|A|\psi\rangle = \langle\psi|A|\psi\rangle^*$$

となり、実数です。 A^2 では、同じ状態のブラケットの内積 (ノルム) の定義から

$$\langle\psi|A^2|\psi\rangle = \langle\psi|AA|\psi\rangle = \langle\psi|A^\dagger A|\psi\rangle = (A|\psi\rangle)^\dagger A|\psi\rangle = \langle\psi'|\psi'\rangle \geq 0 \quad (A|\psi\rangle = |\psi'\rangle)$$

となり、0か正の値を取ります (ただしノルムが 0 になるのは $|\psi'\rangle$ が 0 のとき)。

$\mathbf{J}^2|\phi\rangle$ に左から $\langle\phi|$ をかけば、 J_3 がエルミート演算子なので

$$\begin{aligned}
\langle \phi | \mathbf{J}^2 | \phi \rangle &= \langle \phi | (J_1^2 + J_2^2 + J_3^2) | \phi \rangle \\
&= \langle \phi | (J_1^2 + J_2^2) | \phi \rangle + \langle \phi | J_3^2 | \phi \rangle \\
&= \langle \phi | (J_1^2 + J_2^2) | \phi \rangle + \langle \phi | J_3 J_3 | \phi \rangle \\
&= \langle \phi | (J_1^2 + J_2^2) | \phi \rangle + \langle \phi | J_3^\dagger J_3 | \phi \rangle \\
&= \langle \phi | (J_1^2 + J_2^2) | \phi \rangle + \langle \phi | J_3^\dagger J_3 | \phi \rangle \quad (\langle \phi | J_3^\dagger = (J_3 | \phi \rangle)^\dagger = (\rho | \phi \rangle)^\dagger = \langle \phi | \rho^* = \langle \phi | \rho) \\
&= \langle \phi | (J_1^2 + J_2^2) | \phi \rangle + \langle \phi | \rho^2 | \phi \rangle \\
&= \langle \phi | (J_1^2 + J_2^2) | \phi \rangle + \rho^2 \langle \phi | \phi \rangle \\
\lambda &= \langle \phi | (J_1^2 + J_2^2) | \phi \rangle + \rho^2 \geq 0
\end{aligned}$$

第一項は J_1^2 の $\langle \phi | J_1^2 | \phi \rangle$ と J_2^2 の $\langle \phi | J_2^2 | \phi \rangle$ の和なので ($|\phi\rangle$ は $J_{1,2}$ の固有状態ではない)、0 か正の値です (J_1, J_2 もエルミート演算子)。よって、右辺は 0 か正の値と ρ^2 の和になっているので

$$\lambda \geq \rho^2$$

と分かり、同時に λ が 0 以上であることも分かります。

ここからの方針は、固有値が変化した同時固有状態を作っていく、それがどの範囲内で可能なのかを調べるというものです。なので、必要なのは固有値が変化した同時固有状態です。

ここで、新しい演算子として

$$J_+ = (J_1 + iJ_2), \quad J_- = (J_1 - iJ_2)$$

を定義します。 J_1, J_2 はエルミート演算子なので、 J_+^\dagger と J_-^\dagger は

$$J_+^\dagger = J_-, \quad J_-^\dagger = J_+$$

となります。 J_\pm と J_3 による交換関係は

$$\begin{aligned}
[J_\pm, J_3] &= [J_1 \pm iJ_2, J_3] = [J_1, J_3] \pm i[J_2, J_3] \\
&= -i\hbar J_2 \pm i(i\hbar J_1) \\
&= -i\hbar J_2 \mp \hbar J_1 \\
&= \mp \hbar(J_1 \pm iJ_2) \\
&= \mp \hbar J_\pm
\end{aligned}$$

から

$$[J_+, J_3] = -\hbar J_+, \quad [J_-, J_3] = \hbar J_-$$

\mathbf{J}^2 とでは

$$\begin{aligned}
[J_{\pm}, \mathbf{J}^2] &= [J_{\pm}, J_1^2 + J_2^2 + J_3^2] = [J_{\pm}, J_1^2] + [J_{\pm}, J_2^2] + [J_{\pm}, J_3^2] \\
&= J_1[J_{\pm}, J_1] + [J_{\pm}, J_1]J_1 + J_2[J_{\pm}, J_2] + [J_{\pm}, J_2]J_2 + J_3[J_{\pm}, J_3] + [J_{\pm}, J_3]J_3 \\
&= J_1[\pm iJ_2, J_1] + [\pm iJ_2, J_1]J_1 + J_2[J_1, J_2] + [J_1, J_2]J_2 \mp \hbar J_3 J_{\pm} \mp \hbar J_{\pm} J_3 \\
&= \pm iJ_1[J_2, J_1] \pm i[J_2, J_1]J_1 + J_2[J_1, J_2] + [J_1, J_2]J_2 \mp \hbar J_3 J_{\pm} \mp \hbar J_{\pm} J_3 \\
&= \hbar(\pm J_1 J_3 \pm J_3 J_1 + iJ_2 J_3 + iJ_3 J_2 \mp J_3(J_1 \pm iJ_2) \mp (J_1 \pm iJ_2)J_3) \\
&= \hbar(\pm J_1 J_3 \pm J_3 J_1 + iJ_2 J_3 + iJ_3 J_2 \mp J_3 J_1 - iJ_3 J_2 \mp J_1 J_3 - iJ_2 J_3) \\
&= 0
\end{aligned}$$

となるので

$$[J_{\pm}, \mathbf{J}^2] = 0$$

となり、交換します。

$J_3 J_+$ を $|\phi\rangle$ に作用させると交換関係と $J_3 |\phi\rangle = \rho |\phi\rangle$ から

$$J_3 J_+ |\phi\rangle = ([J_3, J_+] + J_+ J_3) |\phi\rangle = (\hbar J_+ + J_+ J_3) |\phi\rangle = (\hbar J_+ + J_+ \hbar \rho) |\phi\rangle = \hbar(\rho + 1) J_+ |\phi\rangle$$

同様に $J_3 J_-$ では

$$J_3 J_- |\phi\rangle = ([J_3, J_-] + J_- J_3) |\phi\rangle = (-\hbar J_- + J_- J_3) |\phi\rangle = (-\hbar J_- + J_- \hbar \rho) |\phi\rangle = \hbar(\rho - 1) J_- |\phi\rangle$$

これらは、 $J_+ |\phi\rangle = |\phi_+\rangle$ 、 $J_- |\phi\rangle = |\phi_-\rangle$ とすれば

$$J_3 |\phi_+\rangle = \hbar(\rho + 1) |\phi_+\rangle, \quad J_3 |\phi_-\rangle = \hbar(\rho - 1) |\phi_-\rangle$$

なので、 $|\phi_{\pm}\rangle$ は J_3 の固有状態で固有値が $\hbar(\rho \pm 1)$ になっています。そうすると

$$J_3 |\phi\rangle = \hbar \rho |\phi\rangle$$

と比べることで、 $|\phi_{\pm}\rangle$ は $|\phi\rangle$ から $\pm \hbar$ された固有値を持っていることが分かります。これを明確に書くために $|\phi\rangle$ と $|\phi_{\pm}\rangle$ を

$$|\phi; \rho\rangle, \quad |\phi; \rho \pm 1\rangle$$

と書くことにします。そうすれば

$$\begin{aligned}
J_3 |\phi; \rho\rangle &= \hbar \rho |\phi; \rho\rangle \\
J_3 |\phi; \rho \pm 1\rangle &= \hbar(\rho \pm 1) |\phi; \rho \pm 1\rangle \\
J_+ |\phi; \rho\rangle &= |\phi; \rho + 1\rangle, \quad J_- |\phi; \rho\rangle = |\phi; \rho - 1\rangle
\end{aligned} \tag{1}$$

と書けて、 J_3 の固有値がどうなっているのかが見やすくなります。このように J_+ は J_3 の固有値を 1 増加させ、 J_- は 1 減少させる演算子です（正確には \hbar の増減）。このため 2 つを合わせて昇降演算子（ladder operator）と呼

び、それぞれを上昇演算子、下降演算子と呼びます(昇演算子、降演算子とも言います)。これだけでは単にそういう演算子が作れただけなので、さらに見ていきます。

$|\phi; \rho \pm 1\rangle$ は J^2 と J_3 の同時固有状態になっています。これを見るのは簡単で J^2 と J_{\pm} が交換することから

$$J^2|\phi; \rho \pm 1\rangle = J^2 J_{\pm} |\phi; \rho\rangle = J_{\pm} J^2 |\phi; \rho\rangle = \hbar \lambda J_{\pm} |\phi; \rho\rangle = \hbar \lambda |\phi; \rho \pm 1\rangle$$

となるからです。同時に、 J^2 の固有値は $|\phi; \rho\rangle$ と $|\phi; \rho \pm 1\rangle$ で変わらないことも分かります。このことから、 J_{\pm} は J_3 の固有値にしか影響しなく、 $|\phi; \rho \pm 1\rangle$ と書いて問題ないこともあります。

J_{\pm} を複数回作用させてみます。 $\rho \pm 1$ を ρ' と思えば、 $|\phi; \rho \pm 1\rangle = |\phi; \rho'\rangle$ は J_3 の固有状態のままなので、 $|\phi; \rho'\rangle$ に J_{\pm} を作用させると $|\phi; \rho' \pm 1\rangle$ になり、固有値も $\hbar(\rho' \pm 1)$ として出でます。実際に、例えば J_+ を 2 回作用させた場合では

$$\begin{aligned} J_3 J_+^2 |\phi; \rho\rangle &= ([J_3, J_+] + J_+ J_3) J_+ |\phi; \rho\rangle = (\hbar J_+ + J_+ J_3) J_+ |\phi; \rho\rangle \\ &= (\hbar J_+ J_+ + J_+ J_3 J_+) |\phi; \rho\rangle \\ &= (\hbar J_+ J_+ + J_+ ([J_3, J_+] + J_+ J_3)) |\phi; \rho\rangle \\ &= (\hbar J_+ J_+ + \hbar J_+ J_+ + J_+ J_+ J_3) |\phi; \rho\rangle \\ &= \hbar(2 + \rho) J_+^2 |\phi; \rho\rangle \end{aligned}$$

となるので、2 回作用させれば固有値が $2\hbar$ 増えることが確かめられます。そして、この $+2$ の出方から予想できるように、 n 回作用させれば n 回交換関係が出てきて、それによって $+n$ されることが分かります。なので、 J_+ を n 回作用させれば固有値は $n\hbar$ だけ増えます。というわけで、 J_{\pm} を n 回作用させると

$$J_3 J_{\pm}^n |\phi; \rho\rangle = J_3 J_{\pm}^{n-1} |\phi; \rho \pm 1\rangle = \cdots = J_3 |\phi; \rho \pm n\rangle = \hbar(\rho \pm n) |\phi; \rho \pm n\rangle$$

となり、 $|\phi; \rho \pm n\rangle$ は J_3 の固有状態です。

これによって、 J^2 の固有値が同じで、 J_3 の固有値が変化した同時固有状態 $|\phi; \rho \pm n\rangle$ が作れました (J_{\pm} と J^2 は交換するので何回作用しても J^2 の固有状態になる)。これで同時固有状態が手に入ったので、次は $\rho \pm n$ がどんな値が取れるのかです。

すでに $\lambda \geq \rho^2$ の制限があることが分かっているので、 ρ には J^2 の固有値 λ による制限があります。この制限のために、 J_{\pm} を作用させる回数には制限があり、 $\rho \pm n$ には上限と下限があります。 ρ がマイナスの値を持てるなら、 $\lambda = \rho^2$ が ρ の最大値と最小値になっているはずなので

$$-\sqrt{\lambda} \leq \rho \leq \sqrt{\lambda}$$

これから、 ρ の上限を ρ_{max} 、下限を ρ_{min} とすれば

$$\rho_{max} = -\rho_{min}$$

という関係を持ちます。このような関係を持つ ρ_{max} が分かれれば、 λ が何なのか分かります。

また、

$$\begin{aligned} |\phi; \rho + 1\rangle &= J_+ |\phi; \rho\rangle \\ \langle \phi; \rho + 1 | \phi; \rho + 1 \rangle &= \langle \phi; \rho | J_+^\dagger J_+ |\phi; \rho\rangle \end{aligned} \tag{2}$$

この左辺は同じ状態の内積なので

$$\langle \phi; \rho + 1 | \phi; \rho + 1 \rangle \geq 0, \quad \langle \phi; \rho | J_+^\dagger J_+ | \phi; \rho \rangle \geq 0$$

が言えます。これに、 ρ の上限と下限が決められたためにそれを超えた値は J_3 の固有値として存在しないことを踏まえれば、 $J_+ | \phi; \rho \rangle = 0$ が ρ の上限を超えた状態と考えられます。下限も同様にすることで、 ρ_{max}, ρ_{min} の状態に対して

$$J_+ | \phi; \rho_{max} \rangle = 0 \quad (3a)$$

$$J_- | \phi; \rho_{min} \rangle = 0 \quad (3b)$$

となると考えられます (ρ_{max}, ρ_{min} を超えた J_3 の固有値は存在しない。 $J_3 J_+ | \phi; \rho_{max} \rangle = J_3 | \phi; \rho_{max+1} \rangle = 0$)。ちなみに、(3a) と (3b) から $\rho_{max} = -\rho_{min}$ であることを確かめられます。 $J_\mp J_\pm$ を計算してみると

$$\begin{aligned} J_\mp J_\pm &= (J_1 \mp iJ_2)(J_1 \pm iJ_2) = J_1^2 + J_2^2 \pm iJ_1 J_2 \mp iJ_2 J_1 \\ &= \mathbf{J}^2 - J_3^2 \pm i(J_1 J_2 - J_2 J_1) \\ &= \mathbf{J}^2 - J_3^2 \pm i[J_1, J_2] \\ &= \mathbf{J}^2 - J_3^2 \mp \hbar J_3 \end{aligned} \quad (4)$$

と書けます。(3a) に J_- を作用させてこれを使えば

$$\begin{aligned} 0 &= J_- J_+ | \phi; \rho_{max} \rangle \\ &= (\mathbf{J}^2 - J_3^2 - \hbar J_3) | \phi; \rho_{max} \rangle \\ &= (\lambda \hbar^2 - \hbar^2 \rho_{max}^2 - \hbar^2 \rho_{max}) | \phi; \rho_{max} \rangle \end{aligned}$$

となるので

$$\begin{aligned} 0 &= \lambda \hbar^2 - \hbar^2 \rho_{max}^2 - \hbar^2 \rho_{max} \\ \lambda &= \rho_{max}(\rho_{max} + 1) \end{aligned} \quad (5)$$

同様に

$$\begin{aligned} 0 &= J_+ J_- | \phi; \rho_{min} \rangle \\ &= (\mathbf{J}^2 - J_3^2 + \hbar J_3) | \phi; \rho_{min} \rangle \\ &= (\lambda \hbar^2 - \hbar^2 \rho_{min}^2 + \hbar^2 \rho_{min}) | \phi; \rho_{min} \rangle \end{aligned}$$

から

$$\begin{aligned} 0 &= \lambda \hbar^2 - \hbar^2 \rho_{min}^2 + \hbar^2 \rho_{min} \\ \lambda &= \rho_{min}(\rho_{min} - 1) \end{aligned}$$

2つを合わせることで

$$\rho_{max}(\rho_{max} + 1) = \rho_{min}(\rho_{min} - 1) \Rightarrow \rho_{max} = -\rho_{min}$$

となります。

このように J_3 の固有値には上限と下限があり、 $\rho_{max} = -\rho_{min}$ という関係を持っています。そして、 J_- によって ρ は -1 ずつ減っていきます。なので、 ρ_{max} の状態に J_- を作用させていくことで $\rho_{min} = -\rho_{max}$ にたどり着かなくてはいけないです。これを満たすためには

$$\rho_{max} - n = -\rho_{max}$$

$$n = 2\rho_{max}$$

とならなければいけないので (n は整数)、 ρ_{max} は整数か半整数 ($1/2, 3/2, \dots$) である必要があります。

よって、 ρ_{max} を整数か半整数である j と書くことにすれば、 λ は (5) から、 j で指定される

$$\lambda = j(j+1)$$

という値になります。これで J^2 の固有値が求まりました。残っているのは ρ です。

これまでの話から、 J^2 の固有値が同じになる同時固有状態として $|\phi; \rho \pm n\rangle$ があり、その上限と下限が $|\phi; j\rangle, |\phi; -j\rangle$ となっています。このため、 j を適当に与えて J^2 の固有状態を

$$J^2|\phi; j; \rho\rangle = \hbar^2 j(j+1)|\phi; j; \rho\rangle$$

と書いたとき、

$$J^2|\phi; j; j\rangle = \hbar^2 j(j+1)|\phi; j; j\rangle, J^2|\phi; j; j-1\rangle = \hbar^2 j(j+1)|\phi; j; j-1\rangle, \dots, J^2|\phi; j; -j\rangle = \hbar^2 j(j+1)|\phi; j; -j\rangle$$

となる固有状態も J_3 の固有状態なので、 J_3 の ρ は

$$-j, -j+1, \dots, j-1, j$$

の値のどれかになります。

まとめると、 J^2 と J_3 の固有状態と固有値を

$$J^2|\phi\rangle = \hbar^2 j(j+1)|\phi\rangle$$

$$J_3|\phi\rangle = \hbar m|\phi\rangle$$

と書くことには、同時固有状態であるためには、 j は 0 以上の整数か半整数

$$j = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \dots$$

の中から選ぶことになり、 m はその j による $+j$ を上限、 $-j$ を下限とする

$$m = -j, -j+1, \dots, j-1, j$$

のどれかの値です (m は $-j$ から j までの $2j+1$ 個の値が取れる)。これは j によって指定される固有状態 $|\phi; j\rangle$ には $2j+1$ 個の同時固有状態があることを言っています。なので、固有状態 $|\phi\rangle$ を $|j, m\rangle$ と書くことにして

$$\begin{aligned}\mathbf{J}^2|j, m\rangle &= \hbar^2 j(j+1)|j, m\rangle \\ J_3|j, m\rangle &= \hbar m|j, m\rangle\end{aligned}$$

とすると分かりやすいです。例えば、 $j = 2$ という状態は m によって区別されて

$$|2, -2\rangle, |2, -1\rangle, |2, 0\rangle, |2, +1\rangle, |2, +2\rangle$$

という 5 個の同時固有状態があることになります ($j = 2$ の状態が 5 個ある)。

ここで固有状態が出尽くしていることは群論の知識が必要になるのでここでは触れません。簡単に言えば、リー代数 $\mathfrak{su}(2)$ の既約表現は整数か半整数の j によって最大の固有値を持つ固有ベクトルを指定することで与えられるからです。

固有状態と固有値が決まったので、規格化を行います。 $|\phi\rangle$ は規格化されているとしたので、 $|j, m\rangle$ も規格化されています。規格化は離散的な状態の区別を m, n でつければ

$$\langle\psi_m|\psi_n\rangle = \delta_{mn}$$

であり、今は j, m で状態が指定されることから規格化を

$$\langle j, m|j', m'\rangle = \delta_{jj'}\delta_{mm'}$$

と与えます。

このように規格化すると、上で与えた J_\pm の状態への作用の仕方 (1) を今の場合に書き直して

$$J_+|j, m\rangle = |j, m+1\rangle, J_-|j, m\rangle = |j, m-1\rangle$$

としただけでは規格化がされていません。これは (2) を見ると分かって

$$\langle j, m+1|j, m+1\rangle = \langle j, m|J_+^\dagger J_+|j, m\rangle$$

において右辺を計算してみると、 $J_+^\dagger = J_-$ から

$$\begin{aligned}\langle j, m|J_+^\dagger J_+|j, m\rangle &= \langle j, m|J_- J_+|j, m\rangle \\ &= \langle j, m|(\mathbf{J}^2 - J_3^2 - \hbar J_3)|j, m\rangle \\ &= \langle j, m|\hbar^2(j(j+1) - m^2 - m)|j, m\rangle \\ &= \hbar^2(j(j+1) - m^2 - m)\langle j, m|j, m\rangle\end{aligned}$$

となるので、 $\langle j, m|j, m\rangle = \langle j, m+1|j, m+1\rangle = 1$ になってしまいます。というわけで、複素数 C^+ を使って

$$J_+|j, m\rangle = C^+|j, m+1\rangle$$

と定義しなおして

$$|C^+|^2 \langle j, m+1 | j, m+1 \rangle = \langle j, m | J_+^\dagger J_+ | j, m \rangle$$

$$|C^+|^2 = \hbar^2(j(j+1) - m(m+1)) \quad (6)$$

とすることで、規格化 $\langle j, m | j, m \rangle = \langle j, m+1 | j, m+1 \rangle = 1$ がされます。 $|j, m-1\rangle$ でも同様で

$$\langle j, m-1 | j, m-1 \rangle = \langle j, m | J_-^\dagger J_- | j, m \rangle = \langle j, m | J_+ J_- | j, m \rangle$$

$$J_- | j, m \rangle = C^- | j, m-1 \rangle$$

$$J_+ J_- = \mathbf{J}^2 - J_3^2 + \hbar J_3$$

から

$$|C^-|^2 = \hbar^2(j(j+1) - m(m-1)) \quad (7)$$

となります。上の話はこの変更による影響を全く受けなくて、 J_\pm の部分が（規格化をしただけだから）

$$J_+ | j, m \rangle = C_{j,m}^+ | j, m+1 \rangle, \quad J_- | j, m \rangle = C_{j,m}^- | j, m-1 \rangle$$

$$C_{j,m}^\pm = \hbar \sqrt{j(j+1) - m(m \pm 1)} \quad (8)$$

となるだけです。 C^\pm は j, m に依存しているので、 $C_{j,m}^\pm$ としています。ここでは $C_{j,m}^\pm$ は正の値になるように取っています（下の補足参照）。また、 $C_{j,m}^\pm$ は

$$C_{j,j}^+ = \hbar \sqrt{j(j+1) - j(j+1)} = 0, \quad C_{j,-j}^- = \hbar \sqrt{j(j+1) - j(j+1)} = 0$$

となっているので

$$J_+ | j, j \rangle = C_{j,j}^+ | j, j+1 \rangle = 0, \quad J_- | j, -j \rangle = C_{j,-j}^- | j, -j-1 \rangle = 0$$

このように固有値の制限 (3a),(3b) と同じになります。

というわけで、結果をまとめると、交換関係

$$[J_1, J_2] = i\hbar J_3, \quad [J_3, J_1] = i\hbar J_2, \quad [J_2, J_3] = i\hbar J_1$$

に従うエルミート演算子 J_1, J_2, J_3 において、 $\mathbf{J}^2 = J_1^2 + J_2^2 + J_3^2$ と J_3 が交換するとしたとき、 \mathbf{J}^2 と J_3 の同時固有状態と固有値は

$$\mathbf{J}^2 | j, m \rangle = \hbar^2 j(j+1) | j, m \rangle, \quad J_3 | j, m \rangle = \hbar m | j, m \rangle$$

$$\langle j, m | j', m' \rangle = \delta_{jj'} \delta_{mm'}$$

$$j = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \dots, \quad m = -j, -j+1, \dots, j-1, j$$

と与えられます。同時固有状態は m によって区別される $2j+1$ 個があります。また、固有状態 $| j, m \rangle$ は $J_\pm = J_1 \pm i J_2$ という演算子によって

$$J_+|j, m\rangle = C_{j,m}^+|j, m+1\rangle, \quad J_-|j, m\rangle = C_{j,m}^-|j, m-1\rangle \quad C_{j,m}^\pm = \hbar\sqrt{j(j+1) - m(m\pm 1)}$$

と変化させることができます。また、これから

$$\begin{aligned}\langle j, m | J_+ | j, m \rangle &= \langle j, m | J_1 | j, m \rangle + i \langle j, m | J_2 | j, m \rangle = C_{j,m}^+ \langle j, m | j, m+1 \rangle = 0 \\ \langle j, m | J_- | j, m \rangle &= \langle j, m | J_1 | j, m \rangle - i \langle j, m | J_2 | j, m \rangle = C_{j,m}^- \langle j, m | j, m-1 \rangle = 0\end{aligned}$$

なので

$$\langle j, m | J_1 | j, m \rangle = 0, \quad \langle j, m | J_2 | j, m \rangle = 0$$

となっているのが分かります。

ここで具体的な話をします。古典力学での角運動量は位置ベクトル $\mathbf{x} = (x, y, z)$ と運動量ベクトル $\mathbf{p} = (p_x, p_y, p_z)$ による外積によって

$$\mathbf{L} = \mathbf{x} \times \mathbf{p}$$

と定義されています。これを演算子化すれば

$$\hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{x}} \times \hat{\mathbf{p}} \quad (\hat{\mathbf{x}} = \mathbf{x}, \quad \hat{\mathbf{p}} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} = -i\hbar \nabla)$$

となります(これ以降またハットを省略します)。量子力学では、これを軌道角運動量演算子と呼びます。 \mathbf{L} の交換関係は

$$L_x = yp_z - zp_y, \quad L_y = zp_x - xp_z, \quad L_z = xp_y - yp_x$$

から

$$\begin{aligned}[L_x, L_y] &= [yp_z - zp_y, zp_x - xp_z] \\ &= [yp_z, zp_x - xp_z] - [zp_y, zp_x - xp_z] \\ &= [yp_z, zp_x] + [yp_z, zp_x] - [yp_z, xp_z] - [zp_y, zp_x] + [zp_y, xp_z]\end{aligned}$$

\mathbf{x}, \mathbf{p} の交換関係は

$$[x, p_x] = [y, p_y] = [z, p_z] = i\hbar \quad (9)$$

だけが 0 でなく、他のは全て 0 です。なので、

$$[A, BC] = B[A, C] + [A, B]C$$

を使って、交換関係が 0 にならない組み合わせだけを取り出せばよくて

$$\begin{aligned}
[L_x, L_y] &= [yp_z, zp_x] + [yp_z, zp_x] - [yp_z, xp_z] - [zp_y, zp_x] + [zp_y, xp_z] \\
&= [yp_z, zp_x] + [zp_y, xp_z] \\
&= y[p_z, zp_x] + [y, zp_x]p_z + z[p_y, xp_z] + [z, xp_z]p_y \\
&= y[p_z, z]p_x + x[z, p_z]p_y \\
&= -i\hbar yp_x + i\hbar xp_y \\
&= i\hbar(xp_y - yp_x) \\
&= i\hbar L_z
\end{aligned}$$

他も同様に行うことで

$$[L_x, L_y] = i\hbar L_z, \quad [L_z, L_x] = i\hbar L_y, \quad [L_y, L_z] = i\hbar L_x$$

と求まります。これは上での J_1, J_2, J_3 を L_x, L_y, L_z にすれば全く同じ交換関係を構成しています。なので、上の結果と同じものが出てきます。しかし、物理としての要請が入ることによって状況が一部変わります。

「中心力でのシュレーディンガー方程式」で行った式変形を簡単に見ていきます。時間に依存しないシュレーディンガー方程式は

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\mathbf{x}) = E\psi(\mathbf{x})$$

これを極座標

$$x = r \sin \theta \cos \phi, \quad y = r \sin \theta \sin \phi, \quad z = r \cos \theta$$

にすると、 ∇^2 は

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2} \left(\frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right)$$

なので、シュレーディンガー方程式は

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{r^2} \left(\frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) \right) \psi(r, \theta, \phi) = E\psi(r, \theta, \phi)$$

この式は

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) - Er^2 \right) \psi(r, \theta, \phi) = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) \psi(r, \theta, \phi)$$

と書いて、 r の依存性と θ, ϕ の依存性が分離しているので、 $\psi(r, \theta, \phi)$ を

$$\psi(r, \theta, \phi) = R(r)Y(\theta, \phi)$$

と分離して書けます。

L^2 の極座標での形は「中心力でのシュレーディンガー方程式」の補足で求めていて

$$L^2 = -\hbar^2 \left(\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} (\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta}) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) \quad (10)$$

これをシュレーディンガー方程式にいれると

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 \frac{\partial}{\partial r}) - \frac{1}{\hbar^2 r^2} L^2 \right) \psi(r, \theta, \phi) = E \psi(r, \theta, \phi)$$

この中から L^2 の部分だけを取り出します。変数分離の形から、 L^2 には r の微分がないので

$$\begin{aligned} & -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 \frac{\partial}{\partial r}) - \frac{1}{\hbar^2 r^2} L^2 \right) R(r) Y(\theta, \phi) = E R(r) Y(\theta, \phi) \\ & -\frac{\hbar^2}{2m} \left(Y(\theta, \phi) \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 \frac{\partial}{\partial r}) R(r) - \frac{1}{\hbar^2 r^2} R(r) L^2 Y(\theta, \phi) \right) = E R(r) Y(\theta, \phi) \\ & -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{R(r)} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 \frac{\partial}{\partial r}) R(r) - \frac{1}{\hbar^2 r^2} \frac{1}{Y(\theta, \phi)} L^2 Y(\theta, \phi) \right) = E \\ & \frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{R(r)} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 \frac{\partial}{\partial r}) R(r) + r^2 E = \frac{1}{2m} \frac{1}{Y(\theta, \phi)} L^2 Y(\theta, \phi) \end{aligned}$$

この両辺は定数でなければいけないので、 L^2 の式は定数を c とすれば

$$L^2 Y(\theta, \phi) = c Y(\theta, \phi)$$

となります。なので、 $Y(\theta, \phi)$ は L^2 の固有関数です。

演算子 L^2 は上の J^2 と同じ性質を持つので、固有状態と固有値を

$$L^2 |l, m\rangle = \hbar^2 l(l+1) |l, m\rangle$$

と持っています（上での j を l と書いている）。これから L^2 の固有関数（波動関数）とするために、左から $\langle \theta, \phi |$ を作用させることで (L^2 には r の依存性がないから θ, ϕ のみ)

$$\langle \theta, \phi | L^2 |l, m\rangle = \hbar^2 l(l+1) \langle \theta, \phi | l, m\rangle$$

$$L^2 \langle \theta, \phi | l, m\rangle = \hbar^2 l(l+1) \langle \theta, \phi | l, m\rangle$$

$$L^2 Y(\theta, \phi) = \hbar^2 l(l+1) Y(\theta, \phi)$$

2行目では「シュレーディンガー方程式とハイゼンベルク方程式」で触れたように、 L^2 での x は x に、 p は $-i\hbar\nabla$ への置き換えが行われます。今の場合では、上で求めたように演算子 L^2 は微分演算子 (10) に置き換わります。というわけで、 L^2 の固有関数 $Y(\theta, \phi)$ の固有値は $\hbar^2 l(l+1)$ です。これから $Y(\theta, \phi)$ が L^2 と L_3 の同時固有関数となり、 $|j, m\rangle$ と同じ性質を持ちます。なので、 $Y_{l,m}(\theta, \phi)$ と書くことにします（昇降演算子で $Y_{l,m}$ の m を変化させられる）。

そうすると、シュレーディンガー方程式は

$$\begin{aligned}
-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 \frac{\partial}{\partial r}) - \frac{1}{\hbar^2 r^2} \mathbf{L}^2 \right) R(r) Y_{l,m}(\theta, \phi) &= ER(r) Y_{l,m}(\theta, \phi) \\
-\frac{\hbar^2}{2m} \left(Y_{l,m}(\theta, \phi) \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 \frac{\partial}{\partial r}) R(r) - \frac{1}{\hbar^2 r^2} R(r) \mathbf{L}^2 Y_{l,m}(\theta, \phi) \right) &= ER(r) Y_{l,m}(\theta, \phi) \\
-\frac{\hbar^2}{2m} Y_{l,m}(\theta, \phi) \left(\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 \frac{\partial}{\partial r}) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) R(r) &= ER(r) Y_{l,m}(\theta, \phi) \\
-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 \frac{\partial}{\partial r}) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) R(r) &= ER(r)
\end{aligned}$$

となるので

$$\begin{aligned}
-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 \frac{\partial}{\partial r}) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) R(r) &= ER(r) \\
\mathbf{L}^2 Y_{l,m}(\theta, \phi) &= \hbar^2 l(l+1) Y_{l,m}(\theta, \phi)
\end{aligned}$$

として、2つの方程式になります。というわけで、 $Y_{l,m}$ の式は

$$-\left(\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} (\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta}) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) Y_{l,m}(\theta, \phi) = \hbar^2 l(l+1) Y_{l,m}(\theta, \phi)$$

を満たす球面調和関数で、 \mathbf{L}^2 の固有関数です。

ここで大事なのは、このときの $Y_{l,m}$ の l が 0 以上の整数になっている点です。上の話では、 J^2 の固有値 $j(j+1)$ での j は整数だけでなく半整数も許されていました。しかし、軌道角運動量演算子においてはシュレーディンガー方程式からの制限によって、整数しか取れなくなります。

「スピン」で触れるようにスピン（スピン角運動量）にもここで角運動量演算子が使われます。そして、スピンでは整数、半整数どちらも取ります。取れる理由は単純で、実験でどちらも観測されているからです。半整数の場合をフェルミオン、整数の場合をボソンと呼んでいます。フェルミオンは電子、ボソンはパイオンとかです。

ちなみに、角運動量演算子の話の手順として、先に軌道角運動量を使って球面調和関数が固有関数として説明していくこともできます。しかし、そのためには球面調和関数の性質を使わないと昇降演算子の話が出来ないので、非常に面倒になります。ただし、証明が分かりづらいだけなので、今見たように球面調和関数の性質と言いつつ証明なしにすれば、同じ程度の話で済みます。その上、そのままシュレーディンガー方程式が解けるので、物理の話を持って行きやすいです。

・補足

(6),(7) での規格化における位相因子について触れておきます。(6)において規格化定数が

$$|C_{j,m}^+|^2 = \hbar^2 (j(j+1) - m(m+1))$$

と与えられました。 C^+ は複素数です。上ではそのまま

$$C_{j,m}^+ = \hbar \sqrt{j(j+1) - m(m+1)}$$

としましたが、複素数の絶対値は

$$C^* C = |C|^2$$

であることを考えれば

$$C_{j,m}^+ = \hbar e^{i\delta^+} \sqrt{j(j+1) - m(m+1)}$$

と位相因子 $e^{i\delta^+}$ がいるほうがより一般的です (δ^+ は任意の実数)。
 C^- も同様に位相因子を含めて

$$C_{j,m}^- = \hbar e^{i\delta^-} \sqrt{j(j+1) - m(m-1)}$$

となります。これだけだと δ^+ と δ^- は無関係に見えますが、昇降演算子による関係のために、 δ^+ と δ^- には関係があります。(4),(8) を使って $J_+|j, m\rangle$ を計算してみると、

$$\begin{aligned} J_+|j, m\rangle &= C_{j,m}^+|j, m+1\rangle \\ J_-J_+|j, m\rangle &= C_{j,m}^+J_-|j, m+1\rangle \\ (\mathbf{J}^2 - J_3^2 - \hbar J_3)|j, m\rangle &= C_{j,m}^+ C_{j,m+1}^-|j, m\rangle \\ (j(j+1) - m^2 - m)|j, m\rangle &= e^{i\delta^+} e^{i\delta^-} \sqrt{j(j+1) - m(m+1)} \sqrt{j(j+1) - m(m+1)} |j, m\rangle \\ |j, m\rangle &= e^{i\delta^+} e^{i\delta^-} |j, m\rangle \end{aligned}$$

から

$$e^{i\delta^+} e^{i\delta^-} = 1$$

とならなくてはいけないので、

$$\delta^+ = -\delta^-$$

の関係があります。なので、 $\delta^+ = 0$ と選べば自動的に $\delta^- = 0$ になり

$$C_{j,m}^\pm = \hbar \sqrt{j(j+1) - m(m \pm 1)}$$

よって、 $C_{j,m}^\pm$ は正になります。