§2　角運動量と角運動量演算子

「１中心１電子系」に限定せず角運動量に関する内容を一般的に述べる．これらは，量子力学で重要なものが多い．最後に「１中心１電子系」の角度方程式の解である$Y(\theta,\phi)$の具体的関数形を求め，$l(l+1)$の意味を理解する．

(2-1)　古典力学の角運動量

古典力学粒子の角運動量($\vec{l}$)は，ベクトルの外積の定義に従い，その位置ベクトル($\vec{r}$)と運動量ベクトル($\vec{p} = m\vec{v} = m\dot{\vec{r}}$)により次のように与えられる，

$$\vec{l} = \vec{r} \times \vec{p} \tag{2-1-1}$$

角運動量($\vec{l}$)の大きさは，図 2-1-1 を参照して，

$$\left|\vec{l}\right| = \left|\vec{r}\right| \cdot \left|\vec{p}\right| \cdot \sin\theta \tag{2-1-2}$$

で，これは位置ベクトル($\vec{r}$)と運動量ベクトル($\vec{p} = m\vec{v} = m\dot{\vec{r}}$)が作る平行四辺形の面積に等しい．角運動量($\vec{l}$)の方向は，次のように与えられる．位置ベクトル($\vec{r}$)と運動量ベクトル($\vec{p} = m\vec{v} = m\dot{\vec{r}}$)を含む平面内で，位置ベクトル($\vec{r}$)から運動量ベクトル($\vec{p}$)へ角度($\theta$)を測り，これが右ネジの回転角である時の右ネジの進行方向が，角運動量($\vec{l}$)の方向となる(図 1-5-1).

二つのベクトルの外積は一つのベクトルであり，元の各ベクトルと直交する．ベクトルの外積では積の順序を変えると符号が反対になる．また，同一ベクトルの外積は０となる．

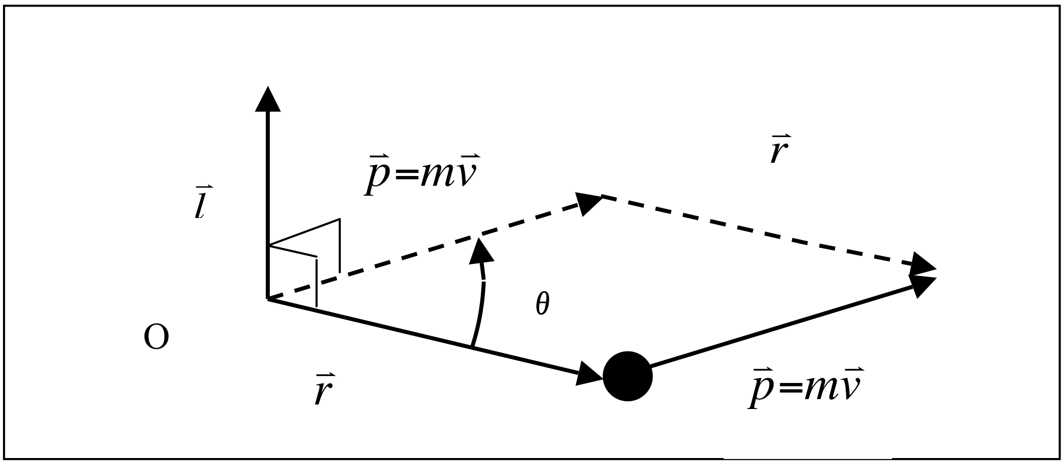

図 2-1-1．質点に対する角運動量の定義

直交座標系の x，y，z 軸の単位ベクトルを$\vec{i}, \vec{j}, \vec{k}$，位置ベクトルを$\vec{r} = (x, y, z)$，

運動量ベクトルを$\vec{\mathrm{p}} = (\mathrm{p_x}, \mathrm{p_y}, \mathrm{p_z})$とする時，角運動量$\vec{l} = (l_x, l_y, l_z)$は次のような行列式で与えられる，

$$\vec{l} = \vec{r} \times \vec{p} = \begin{vmatrix} \vec{i} & \vec{j} & \vec{k} \\ x & y & z \\ p_x & p_y & p_z \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} y & z \\ p_y & p_z \end{vmatrix} \cdot \vec{i} - \begin{vmatrix} x & z \\ p_x & p_z \end{vmatrix} \cdot \vec{j} + \begin{vmatrix} x & y \\ p_x & p_y \end{vmatrix} \cdot \vec{k} \qquad (2\text{-}1\text{-}3)$$

$$= (l_x, l_y, l_z)$$

この結果はベクトルの外積の定義から得られるので，ベクトル解析の教科書で確認しておく．従って，角運動量$\vec{l} = (l_x, l_y, l_z)$の直交座標成分は，

$$\begin{aligned} l_x &= y \cdot p_z - z \cdot p_y \\ l_y &= z \cdot p_x - x \cdot p_z \\ l_z &= x \cdot p_y - y \cdot p_x \end{aligned} \qquad (2\text{-}1\text{-}4)$$

となる．

ここで，$l_x = y \cdot p_z - z \cdot p_y$の時間微分をとると，

$$\dot{l}_x = \dot{y} \cdot p_z + y \cdot \dot{p}_z - (\dot{z} \cdot p_y + z \cdot \dot{p}_y) = (\dot{y} \cdot p_z - \dot{z} \cdot p_y) + (y \cdot \dot{p}_z - z \cdot \dot{p}_y)$$

で，他の$\dot{l}_y, \dot{l}_z$も同様の形になるので，これは

$$\dot{\vec{l}} = \frac{d}{dt}(\vec{r} \times \vec{p}) = (\frac{d}{dt}\vec{r}) \times \vec{p} + \vec{r} \times (\frac{d}{dt}\vec{p}) = \dot{\vec{r}} \times \vec{p} + \vec{r} \times \dot{\vec{p}}$$

である．外積の微分は通常の積の微分則に従う．

「中心力場における一粒子の角運動量$(\vec{l})$」

角運動量の重要性を理解する為に，中心力場における一個の粒子の運動を考える．中心力場とは，座標原点とその質点を結ぶ方向のみに相互作用の力が作用し，その大きさは原点からの距離のみに依る場合である．座標原点に置かれた正電荷とクーロン相互作用しながら運動する一個の電子を考えれば良い（図1-1-１）．$|\vec{r}| = r$とすると，この運動に対する Newton の運動方程式は，

$$m\ddot{\vec{r}} = \vec{F} = f(r) \cdot \frac{\vec{r}}{r} \qquad (2\text{-}1\text{-}5)$$

と書ける．一方，角運動量$(\vec{l})$の時間微分は，

$$\frac{d}{dt}(\vec{l}) = \frac{d}{dt}(\vec{r} \times m\dot{\vec{r}}) = \dot{\vec{r}} \times (m\dot{\vec{r}}) + \vec{r} \times (m\ddot{\vec{r}}) \qquad (2\text{-}1\text{-}6)$$

となる．最後の項に Newton の運動方程式を代入すれば，

$$\frac{d}{dt}(\vec{l}) = \frac{d}{dt}(\vec{r} \times m\dot{\vec{r}}) = m(\dot{\vec{r}} \times \dot{\vec{r}}) + m\frac{f(r)}{r}(\vec{r} \times \vec{r}) = 0 \qquad (2\text{-}1\text{-}7)$$

となることがわかる．同一ベクトルの外積はゼロだからである．従って，
中心力場における一粒子系の運動では，その角運動量($\bar{l}$)は一定である.「角運動量($\bar{l}$)は保存される」とも言う．

角運動量($\bar{l}$)は一定であるから，この方向を z 軸に一致させた場合を具体的に考える．粒子の運動は x-y 面内にあることになる．即ち，

$$\bar{l} = (0, 0, l_z),\ r = (x, y, 0),\ p = (p_x, p_y, 0) \tag{2-1-8}$$

である．

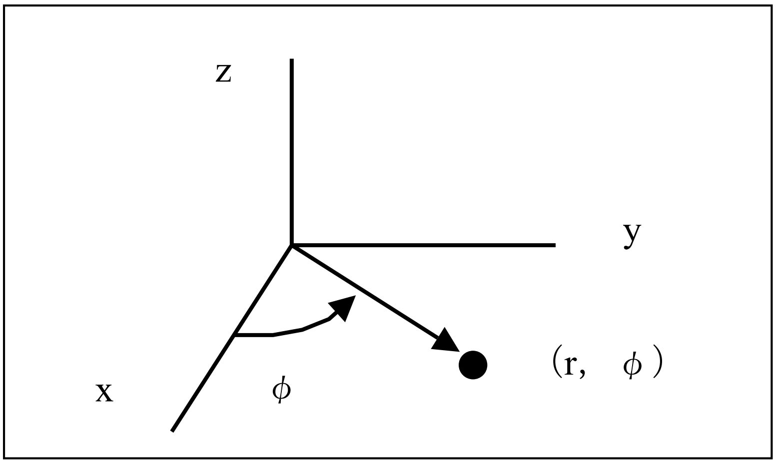

図 2-1-2．x，y−平面における一粒子系の運動

粒子の位置を図 2-1-2 の極座標系で表せば，x = r cosϕ，y = r sinϕ　であるから，これを時間微分して，

$$\dot{x} = \dot{r}\cos\phi - r\sin\phi\cdot\dot{\phi},\quad \dot{y} = r\sin\phi + r\cos\phi\cdot\dot{\phi}$$

である．これを，$l_z = x\cdot p_y - y\cdot p_x$　に代入すれば，角運動量($\bar{l}$)が得られる．その結果は

$$l_z = x\cdot p_y - y\cdot p_x = mr^2(\cos^2\phi + \sin^2\phi)\cdot\dot{\phi} = mr^2\frac{d\phi}{dt} \tag{2-1-9}$$

となる．$\bar{l} = (0, 0, l_z)$ が一定であるとは，z 軸の廻りの回転運動の角速度が一定であることを意味している．次に，多粒子系の場合を考えてみる．

「中心力場における多粒子系の全角運動（$\bar{L}$)」

粒子間の相互作用は二つの粒子を結ぶ方向のみに作用し，その力の大きさは

二つの粒子間距離のみに依存するとする．複数の荷電粒子がクーロン力を及ぼしあいながら運動している状況を考えれば良い．ただし，電荷は各粒子に固有であるとする．２粒子系で一方を座標原点に固定した場合が，前述の中心力場における１粒子系になるので，広い意味での「中心力場」における多粒子系を考えることになる．
粒子ｉと粒子ｊの位置ベクトルを，$\vec{r}_i$，$\vec{r}_j$とし，両者の距離を$r_{ij} = |\vec{r}_{ij}| = |\vec{r}_i - \vec{r}_j|$とすると，粒子ｉに作用する粒子ｊによる力は，

$$\vec{F}_{ij} = f(r_{ij}) \cdot \frac{\vec{r}_{ij}}{r_{ij}} \tag{2-1-10}$$

と書ける．$\dfrac{\vec{r}_{ij}}{r_{ij}}$は粒子ｊから粒子ｉに向かう単位ベクトルである．荷電粒子の電荷は一般には等しくないので，スカラーの粒子間距離が$r = r_{ij} = r_{kl}$であっても，一般には粒子対が異なれば，$f(r_{ij}) \neq f(r_{kl})$である．本当は，$f(r_{ij}) \equiv f_{ij}(r_{ij})$と書くべきだが，これを略記していることに注意．従って，粒子ｉに対する Newton の運動方程式は，他の粒子から受ける力を全部加えて，次のように書ける．

$$m_i \ddot{\vec{r}}_i = \sum_{j(j \neq i)} \vec{F}_{ij} = \sum_{j(j \neq i)} f(r_{ij}) \cdot \frac{\vec{r}_{ij}}{r_{ij}} \tag{2-1-11}$$

　ところで，多粒子系全体の全角運動量（$\vec{L}$）は次のように定義される．

$$\vec{L} = \sum_i r_i \times p_i = \sum_i r_i \times (m_i \dot{\vec{r}}_i) \tag{2-1-1２}$$

個々の粒子の角運動量はベクトルであるから，これを全粒子についてベクトル和をとったものが全角運動量（$\vec{L}$）である．「中心力場」における多粒子系ではこの全角運動量（$\vec{L}$）が保存されことが大変重要である．

　１粒子の場合(2-1-7)と同じように，$\vec{L}$の時間微分を求めてこれを確認してみよう．同一ベクトルの外積は０であることに注意して，

$$\frac{d}{dt}(\vec{L}) = \frac{d}{dt}\{\sum_i (\vec{r}_i \times m\dot{\vec{r}}_i)\} = \sum_i (\dot{\vec{r}}_i \times m\dot{\vec{r}}_i) + \sum_i (\vec{r}_i \times m\ddot{\vec{r}}_i) = \sum_i (\vec{r}_i \times m\ddot{\vec{r}}_i)$$

となる．これに Newton の運動方程式を代入すれば，

$$\frac{d}{dt}(\vec{L}) = \sum_i (\vec{r}_i \times m_i \ddot{\vec{r}}_i) = \sum_i \vec{r}_i \times \{\sum_{j(j \neq i)} f(r_{ij}) \frac{\vec{r}_{ij}}{r_{ij}}\} \tag{2-1-13}$$

である．作用反作用の法則から，$\vec{F}_{ij} = -\vec{F}_{ji}$　であるので，

$$\vec{r}_i \times \vec{F}_{ij} + \vec{r}_j \times \vec{F}_{ji} = (\vec{r}_i - \vec{r}_j) \times \vec{F}_{ij} = \vec{r}_{ij} \times f(r_{ij}) \frac{\vec{r}_{ij}}{r_{ij}} = 0 \tag{2-1-14}$$

である．この最初の等式の内容を考えると (2-1-13)右辺の二重和は，$i > j$　とした次の一重和に等しいことがわかる．

$$\frac{d}{dt}(\vec{L}) = \sum_i \vec{r}_i \times \{\sum_{j(j\neq i)} f(r_{ij})\frac{\vec{r}_{ij}}{r_{ij}}\} = \sum_{\mathrm{i>j}} (\vec{r}_i - \vec{r}_j) \times f(r_{ij})\frac{\vec{r}_{ij}}{r_{ij}} = \sum_{\mathrm{i>j}} \vec{r}_{ij} \times f(r_{ij})\frac{\vec{r}_{ij}}{r_{ij}} = 0$$

そして，一重和の各項は(A2-1-14)の最後の等式にあるように，同一ベクトルの外積で０である．従って，全角運動量（$\vec{L}$）の時間微分は０であり，全角運動量（$\vec{L}$）は保存される．

以上のように, 古典力学では, 中心力場における 1 粒子の運動の角運動量($\vec{l}$)は保存される．多粒子系であっても，電荷粒子のクーロン相互作用のように，力は各粒子対を結ぶ方向にのみに作用し，その大きさは粒子間距離のみによって与えられる「広義の中心力場」では，全角運動量（$\vec{L}$）が保存量である．このような古典力学の$\vec{l}$や$\vec{L}$は，量子力学にあっては演算子に姿を変えるが，やはり，運動を恒量を記述する．角運動量がどのような演算子となり，どのような性質を持つかを次に考える．

(2-2)　角運動量演算子とその交換関係

「１粒子の角運動演算子と交換関係」

量子力学の角運動量演算子$(\hat{l})$は，(1-2-1)の運動量を次の演算子に置き換えること

$$\vec{p} = (p_x, p_y, p_z) \to (\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial y}, \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial z})$$

を古典力学的角運動量$(\vec{l} = \vec{r} \times \vec{p})$に適用すれば良い．その結果は，

$$\hat{l}_x = \frac{\hbar}{i}(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}),\quad \hat{l}_y = \frac{\hbar}{i}(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}),\quad \hat{l}_z = \frac{\hbar}{i}(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}) \qquad \text{(2-2-1)}$$

となる．古典力学的運動量は$\vec{p} = (p_x, p_y, p_z) = p_x\vec{i} + p_y\vec{j} + p_z\vec{k}$　であり，一方，ナブラは$\nabla = (\frac{\partial}{\partial x})\vec{i} + (\frac{\partial}{\partial y})\vec{j} + (\frac{\partial}{\partial z})\vec{k}$　であるから，上記の置き換えは，$\vec{p} \to (\hbar/i)\nabla$ である．従って，(2-2-1)は次の様に書ける，

$$\hat{l} = \vec{r} \times (\frac{\hbar}{i}\nabla) = (\frac{\hbar}{i})\vec{r} \times \nabla \qquad \text{(2-2-2)}$$

このように与えられる角運動量演算子$(\hat{l})$には，交換関係（commutation relations）と呼ばれる次の重要な関係が成り立っている．

$$\begin{aligned} &\hat{l}_x\hat{l}_y - \hat{l}_y\hat{l}_x = i\hbar\hat{l}_z, \\ &\hat{l}_y\hat{l}_z - \hat{l}_z\hat{l}_y = i\hbar\hat{l}_x, \\ &\hat{l}_z\hat{l}_x - \hat{l}_x\hat{l}_z = i\hbar\hat{l}_y, \end{aligned} \qquad \text{(2-2-3)}$$

これが成立することは，例えば，$\hat{l}_x\hat{l}_y - \hat{l}_y\hat{l}_x = i\hbar\hat{l}_z$，の場合，

$$\hat{l}_x\hat{l}_y = -\hbar^2(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y})(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}) = \cdots$$

$$\hat{l}_y\hat{l}_x = -\hbar^2(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z})(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}) = \cdots$$

を具体的に求め，$\frac{\partial^2}{\partial x \partial z} = \frac{\partial^2}{\partial z \partial x}$, *etc.*　に注意すれば, 両者の差が$\hat{l}_x\hat{l}_y - \hat{l}_y\hat{l}_x = i\hbar\hat{l}_z$　であることが判る．他の場合も同様に確認できる．

一般に，二つの線形演算子$\hat{A}$, $\hat{B}$　から作られた，次のような演算子

$$[\hat{A}, \hat{B}] \equiv \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} \qquad \text{(2-2-4)}$$

は「$\hat{A}$と$\hat{B}$の交換子（commucator)」と呼ばれる．(2-2-3)の左辺は，この交換子

になっているから，(2-2-3)は

$$[\hat{l}_x, \hat{l}_y] = \hat{l}_x \hat{l}_y - \hat{l}_y \hat{l}_x = i\hbar \hat{l}_z,$$
$$[\hat{l}_y, \hat{l}_z] = \hat{l}_y \hat{l}_z - \hat{l}_z \hat{l}_y = i\hbar \hat{l}_x, \qquad (2\text{-}2\text{-}5)$$
$$[\hat{l}_z, \hat{l}_x] = \hat{l}_z \hat{l}_x - \hat{l}_x \hat{l}_z = i\hbar \hat{l}_y,$$

と書ける．交換子の二つの変数と右辺の変数の組みは，上から（x，y，<u>z</u>），（y，z，<u>x</u>），（z，x，<u>y</u>）と循環的であるので記憶には便利である．下線は右辺側にある変数を意味する．

この交換関係は，ベクトルの外積の形式を借用すると１行で書ける．(2-1-3)で見たように，二つのベクトル$\vec{A}$, $\vec{B}$ の外積は，

$$\vec{A} \times \vec{B} = (A_y B_z - A_z B_y)\vec{i} + (A_z B_x - A_x B_z)\vec{j} + (A_x B_y - A_y B_x)\vec{k} \qquad (2\text{-}2\text{-}6)$$

である．ここで，$\vec{B} \to \vec{A}$ の置き換えを行うと，

$$\vec{A} \times \vec{A} = (A_y A_z - A_z A_y)\vec{i} + (A_z A_x - A_x A_z)\vec{j} + (A_x A_y - A_y A_x)\vec{k} \qquad (2\text{-}2\text{-}7)$$

$A_y A_z = A_z A_y$，$A_z A_x = A_x A_z$，$A_x A_y = A_y A_x$ であり，$\vec{A} \times \vec{A} = 0$ である（同一ベクトルの外積は０）．しかし，(2-2-7)で，$\vec{A} \to \hat{A}$ として演算子に置き換えると，

$$\hat{A} \times \hat{A} = (\hat{A}_y \hat{A}_z - \hat{A}_z \hat{A}_y)\vec{i} + (\hat{A}_z \hat{A}_x - \hat{A}_x \hat{A}_z)\vec{j} + (\hat{A}_x \hat{A}_y - \hat{A}_y \hat{A}_x)\vec{k} \qquad (2\text{-}2\text{-}8)$$

である．これは交換関係(2-2-3)の左辺側に対応している．ベクトルの外積の形式を借用した(2-2-8)を用いると，交換関係は

$$\hat{l} \times \hat{l} = i\hbar \hat{l} \qquad (2\text{-}2\text{-}9)$$

となる．$\hbar \to 0$ の極限では，$\hat{l} \times \hat{l} \to 0$ であり，古典力学の$\bar{l} \times \bar{l} = 0$に対応する．

「可換演算子と同時固有関数」

$\hat{A}$と$\hat{B}$の交換子，$[\hat{A}, \hat{B}] \equiv \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$ ，に関して，次の重要な定理が存在する．

$$[\hat{A}, \hat{B}] \equiv \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = 0 \qquad (2\text{-}2\text{-}10)$$

が成り立つ時，$\hat{A}$と$\hat{B}$は「可換な演算子である（commuting operators)」と言い，両演算子は共通の同時固有関数を持つ．$\hat{A}$と$\hat{B}$が可換であることは，両者が共通の同時固有関数を持つ為の必要十分条件である．「共通の同時固有関数」は，単に「共通の固有関数」，「同時固有関数」とも呼ばれる．

この定理は，次のように確認できる．同一のベクトル空間に作用する二つの線形演算子$\hat{A}$と$\hat{B}$が共通の固有関数（ψ）を持つとすれば，

$$\hat{A}\psi = \lambda\psi, \qquad \hat{B}\psi = \mu\psi \qquad (2\text{-}2\text{-}11)$$

λ, μ　は各々の固有値で，全て異なる単なる数であるとする．従って，

$$\hat{A}\hat{B}\psi = \hat{A}(\hat{B}\psi) = \hat{A}(\mu\psi) = \mu(\hat{A}\psi) = \mu\lambda\psi$$

$$\hat{B}\hat{A}\psi = \hat{B}(\hat{A}\psi) = \hat{B}(\lambda\psi) = \lambda(\hat{B}\psi) = \lambda\mu\psi$$

であるから，$\hat{A}\hat{B}\psi - \hat{B}\hat{A}\psi = (\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})\psi = 0$ であり，$\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = 0$　となる．

一方，$\hat{A}$ と $\hat{B}$ が可換で，$\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = 0$　であるとする．この時，$\hat{A}$ の固有関数を ψ とすると，$\hat{A}\hat{B}\psi = \hat{B}\hat{A}\psi = \hat{B}(\lambda\psi) = \lambda\hat{B}\psi$ となる．これは，$\hat{A}(\hat{B}\psi) = \lambda(\hat{B}\psi)$ であるから，$\hat{B}\psi$ は，$\hat{A}$ の固有値 λ に属する固有関数であることを意味しており，$\hat{B}\psi$ は ψ を定数倍したものに等しいと考えて良い．即ち，$\hat{B}\psi = \mu\psi$　となる．

以上は，固有値が縮重していない場合であるが，$\hat{A}$ の固有値が n 重に縮重しており，一つの固有値 λ_i に対して n 個の 1 次独立な固有関数が対応する場合は，一般的には，これら固有関数の任意の一次結合が固有値 λ_i の固有関数となる．この場合も同様にして上記の定理を証明できる（Messiah，1961；原田，1978）．

「多粒子系の全角運動量演算子（$\hat{L}$）とその交換関係」

N 個の粒子からなる系の古典力学的全角運動量は，各粒子の角運動量のベクトル和であったから，n 番目の粒子について，1 粒子系の場合(2-2-2)と同じように，

$$\hat{l}^{(n)} = \vec{r}^{(n)} \times (\frac{\hbar}{i}\nabla)^{(n)} = (\frac{\hbar}{i})\vec{r}^{(n)} \times \nabla^{(n)} \qquad (2\text{-}2\text{-}12)$$

となる．この全粒子についての和が多粒子系の全角運動量演算子（$\hat{L}$）

$$\hat{L} = \sum_{n=1}^{N} \hat{l}^{(n)}$$

を与える．即ち，

$$\begin{aligned}
\hat{L}_x &= \hat{l}_x^{(1)} + \hat{l}_x^{(2)} + \cdots + \hat{l}_x^{(N)} = \sum_{n=1}^{N} \hat{l}_x^{(n)} \\
\hat{L}_y &= \hat{l}_y^{(1)} + \hat{l}_y^{(2)} + \cdots + \hat{l}_y^{(N)} = \sum_{n=1}^{N} \hat{l}_y^{(n)} \qquad (2\text{-}2\text{-}13) \\
\hat{L}_z &= \hat{l}_z^{(1)} + \hat{l}_z^{(2)} + \cdots + \hat{l}_z^{(N)} = \sum_{n=1}^{N} \hat{l}_z^{(n)}
\end{aligned}$$

である．

各粒子, 例えば, n 番目の粒子の角運動量演算子成分は 1 粒子の場合と同じで, 相互に可換ではなく，(2-2-5)の交換関係を満足するだけである．しかし，別の粒

子の角運動量演算子成分とは可換である．別粒子は別の座標変数を持つからである．後に見るように，同一粒子であっても，スピン角運動量演算子成分と軌道角運動量演算子成分は可換である．これも，スピン座標と空間座標が異なるからである．次の全角運動量演算子成分の交換子は，

$$[\hat{L}_x,\hat{L}_y] = (\sum_{n=1}^{N}\hat{l}_x^{(n)})(\sum_{n=1}^{N}\hat{l}_y^{(n)}) - (\sum_{n=1}^{N}\hat{l}_y^{(n)})(\sum_{n=1}^{N}\hat{l}_x^{(n)})$$

$$= \sum_{n=1}^{N}\ \sum_{n'=1}^{N}\hat{l}_x^{(n)}\hat{l}_y^{(n')} - \sum_{n=1}^{N}\ \sum_{n'=1}^{N}\hat{l}_y^{(n)}\hat{l}_x^{(n')} = \sum_{n=1}^{N}\ \sum_{n'=1}^{N}(\hat{l}_x^{(n)}\hat{l}_y^{(n')} - \hat{l}_y^{(n)}\hat{l}_x^{(n')})$$

となるが，別粒子の角運動成分とは可換であるので，結局，同一粒子の交換子のみが残る．従って，上記の最後の２重和は，同一粒子に関する単純和となり，

$$[\hat{L}_x,\hat{L}_y] = \sum_{n=1}^{N}\ \sum_{n'=1}^{N}(\hat{l}_x^{(n)}\hat{l}_y^{(n')} - \hat{l}_y^{(n)}\hat{l}_x^{(n')})$$

$$= \sum_{n=1}^{N}(\hat{l}_x^{(n)}\hat{l}_y^{(n)} - \hat{l}_y^{(n)}\hat{l}_x^{(n)}) = i\hbar\sum_{n=1}^{N}\hat{l}_z^{(n)} = i\hbar\hat{L}_z$$

となる．他の交換子についても同様であるから，多粒子系の全角運動量演算子（$\hat{\boldsymbol{L}}$）についても，１粒子の角運動量演算子と同様な交換関係が成立する．

$$\begin{aligned}
[\hat{L}_x,\hat{L}_y] &= i\hbar\hat{L}_z \\
[\hat{L}_y,\hat{L}_z] &= i\hbar\hat{L}_x \\
[\hat{L}_z,\hat{L}_x] &= i\hbar\hat{L}_y
\end{aligned} \qquad (2\text{-}2\text{-}14)$$

又は，単純に，　$\hat{L}\times\hat{L} = i\hbar\hat{L}$　である．

　後に述べる１電子のスピン角運動量演算子（$\hat{s}$）も，多電子系における$\hat{s}$の和である全スピン角運動量演算子（$\hat{S}$）も，（$\hat{l}$）や（$\hat{\boldsymbol{L}}$）の交換関係(A2-2-5), (A2-2-14)と全く同様な交換関係を用いて定義される．

　量子力学では，角運動量一般を$\hat{J}$　とした時，

$$\begin{aligned}
[\hat{J}_x,\hat{J}_y] &= i\hbar\hat{J}_z \\
[\hat{J}_y,\hat{J}_z] &= i\hbar\hat{J}_x \qquad \text{or} \qquad \hat{J}\times\hat{J} = i\hbar\hat{J} \\
[\hat{J}_z,\hat{J}_x] &= i\hbar\hat{J}_y
\end{aligned} \qquad (2\text{-}2\text{-}15)$$

なる交換関係が成立することをもって，角運動量$\hat{J}$の定義としている．

　これまでの（全）角運動量演算子は，電子の軌道運動に関するものである．一般の角運動量演算子と区別する為に，（全）軌道角運動量演算子と呼んだ方が

良い．しかし，呼称が長くなるので，以後，演算子という言葉を省略し，単に，軌道角運動量($\hat{l}$)，全軌道角運動量（$\hat{L}$）と書くこともある．

(2-3)　角運動量の２乗演算子と昇降演算子

量子力学における角運動量の定義が判ったので，これに関連した新たな演算子をさらに定義する. 角運動量の２乗演算子（squared angular momentum operator）と昇降演算子(raising and lowering operators)がこれである. これら演算子間には重要な代数的関係がある.

「角運動量の２乗演算子（$\hat{J}^2$）」

角運動量（の大きさ）の２乗演算子を次のように定義する，

$$\hat{J}^2 \equiv \hat{J}\hat{J} = \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 + \hat{J}_z^2 \qquad (2\text{-}3\text{-}1)$$

このように定義された角運動量の２乗演算子（$\hat{J}^2$）は，$\hat{J}_x$，$\hat{J}_y$，$\hat{J}_z$　の各成分と可換である．即ち，

$$[\hat{J}^2, \hat{J}_x] = 0, \quad [\hat{J}^2, \hat{J}_y] = 0, \quad [\hat{J}^2, \hat{J}_z] = 0 \qquad (2\text{-}3\text{-}2)$$

が成立する．これらは，

$$[\hat{A}^2, \hat{B}] = \hat{A}^2\hat{B} - \hat{B}\hat{A}^2 = \hat{A}^2\hat{B} - \hat{A}\hat{B}\hat{A} + \hat{A}\hat{B}\hat{A} - \hat{B}\hat{A}^2$$
$$= \hat{A}(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}) + (\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})\hat{A} = \hat{A}[\hat{A}, \hat{B}] + [\hat{A}, \hat{B}]\hat{A}$$

であることを使うと，簡単に確認することができる．

(2-3-2)から，$\hat{J}^2$ は角運動量成分（$\hat{J}_x$，$\hat{J}_y$，$\hat{J}_z$）の何れとも可換であるから，共通の同時固有関数を持つ．しかし $\hat{J}_x$，$\hat{J}_y$，$\hat{J}_z$ は相互に可換ではなく，交換関係が成立するだけであるので，$\hat{J}_x$，$\hat{J}_y$，$\hat{J}_z$ のうちどれか一つを選び，$\hat{J}^2$ との共通な固有関数を考える．通常は，$\hat{J}_z$ と $\hat{J}^2$ の共通な同時固有関数を考える．角度方程式を満足する固有関数は，$\hat{J}_z$ と $\hat{J}^2$ の共通な同時固有関数であることが後に判るはずである．

「昇降演算子（$\hat{J}_+$, $\hat{J}_-$）」

次のように上昇演算子（$\hat{J}_+$）と下降演算子（$\hat{J}_-$）を定義する，

$$\hat{J}_+ = \hat{J}_x + i\hat{J}_y, \qquad \hat{J}_- = \hat{J}_x - i\hat{J}_y \qquad (2\text{-}3\text{-}3)$$

それぞれ，raising operator, lowering operator とか，step-up operator, step-down operator とか呼ばれる．まとめて書けば，

$$\hat{J}_\pm = \hat{J}_x \pm i\hat{J}_y \qquad (2\text{-}3\text{-}4)$$

である．これに対して昇降演算子の呼称が対応する．英語では，ladder operators「梯子（はしご）」演算子の意味である．後に見るように，$\hat{J}_\pm$を作用させると，固有値が$\pm\hbar$だけ異なる固有関数が得られる．この状況が，一本の梯子を一段づ

つ上がって行ったり，下って行ったりすることに似ているので，「梯子」演算子の総称となっている．

(A2-3-3)の定義と（$\hat{J}_x$，$\hat{J}_y$，$\hat{J}_z$）の交換関係の定義から，次ぎの関係が成り立つ，

$$\begin{aligned} [\hat{J}_z, \hat{J}_+] &= \hbar \hat{J}_+ \\ [\hat{J}_z, \hat{J}_-] &= \hbar \hat{J}_- \\ [\hat{J}_+, \hat{J}_-] &= 2\hbar \hat{J}_z \end{aligned} \qquad (2\text{-}3\text{-}5)$$

これは，交換子を具体的に書いて，（$\hat{J}_x$，$\hat{J}_y$，$\hat{J}_z$）の交換関係を用いれば確認できる．

さらに，$\hat{J}^2$ と $\hat{J}_\pm$ が可換，即ち，

$$[\hat{J}^2, \hat{J}_+] = 0, \quad [\hat{J}^2, \hat{J}_-] = 0 \quad \text{まとめて} \quad [\hat{J}^2, \hat{J}_\pm] = 0 \qquad (2\text{-}3\text{-}6)$$

が成り立つ．　$\hat{J}^2$ は角運動量演算子成分（$\hat{J}_x$，$\hat{J}_y$，$\hat{J}_z$）の何れとも可換であるから，$[\hat{J}^2, \hat{J}_\pm] = \hat{J}^2(\hat{J}_x \pm i\hat{J}_y) - (\hat{J}_x \pm i\hat{J}_y)\hat{J}^2 = [\hat{J}^2, \hat{J}_x] \pm i[\hat{J}^2, \hat{J}_y] = 0$ となる．

また，次の関係も成り立つ，

$$\begin{aligned} \hat{J}_+\hat{J}_- &= \hat{J}^2 - \hat{J}_z(\hat{J}_z - \hbar) \\ \hat{J}_-\hat{J}_+ &= \hat{J}^2 - \hat{J}_z(\hat{J}_z + \hbar) \end{aligned} \qquad (2\text{-}3\text{-}7)$$

この関係は次のようにして確認できる．定義の(2-3-3)から，

$$\hat{J}_+\hat{J}_- + \hat{J}_-\hat{J}_+ = (\hat{J}_x + i\hat{J}_y)(\hat{J}_x - i\hat{J}_y) + (\hat{J}_x - i\hat{J}_y)(\hat{J}_x + i\hat{J}_y) = 2(\hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2) \qquad (2\text{-}3\text{-}8)$$

である．一方　$\hat{J}_+\hat{J}_- - \hat{J}_-\hat{J}_+ = [\hat{J}_+, \hat{J}_-]$　であるから(A2-3-5)の３番目の等式より，

$$\hat{J}_+\hat{J}_- - \hat{J}_-\hat{J}_+ = [\hat{J}_+, \hat{J}_-] = 2\hbar \hat{J}_z \qquad (2\text{-}3\text{-}9)$$

(2-3-8)＋(2-3-9)を作り，２で割れば，(2-3-7)の第１の等式が得られる．(2-3-7)の第２の等式は，(2-3-9)− (2-3-8)を作り，２で割ったものになっている．

以上の角運動量の２乗演算子と昇降演算子に関わる代数的関係式は，角運動量の固有値に関する次の議論で多用される．

(2-4)　角運動量の固有値

角運動量の交換関係から，以下の固有値に関する重要な結論が得られる．角運動量の２乗演算子（$\hat{J}^2$）と角運動量演算子の Z 成分（$\hat{J}_z$）は，可換であり，共通の固有関数が存在するから，$\hat{J}^2$ の固有値を b，$\hat{J}_z$ の固有値を c とし，共通の固有関数を ψ_{bc} とする．即ち，

$$(\hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 + \hat{J}_z^2)\psi_{bc} = b\psi_{bc} \qquad (2\text{-}4\text{-}1)$$

$$\hat{J}_z\psi_{bc} = c\psi_{bc} \qquad (2\text{-}4\text{-}2)$$

である．　(2-4-2 の両辺に左から $\hat{J}_z$ を作用させる，

$$\hat{J}_z(\hat{J}_z\psi_{bc}) = \hat{J}_z^2\psi_{bc} = c\hat{J}_z\psi_{bc} = c^2\psi_{bc} \qquad (2\text{-}4\text{-}3)$$

この結果を(2-4-1)の両辺から差し引くと，

$$(\hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2)\psi_{bc} = (b - c^2)\psi_{bc} \qquad (2\text{-}4\text{-}4)$$

これは，$(\hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2)$ の固有値が $(b - c^2)$ であることを意味している．$(\hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2)$ の固有値であるから，これは負になることはない，

$$(b - c^2) \geq 0 \qquad (2\text{-}4\text{-}5)$$

昇降演算子に左から $\hat{J}_z$ を作用させてみると，

$$\hat{J}_z(\hat{J}_x \pm i\hat{J}_y) = \hat{J}_z\hat{J}_x \pm i\hat{J}_z\hat{J}_y \qquad (2\text{-}4\text{-}6)$$

となる．角運動量の交換関係(2-2-15)から，

$$\hat{J}_z\hat{J}_x - \hat{J}_x\hat{J}_z = i\hbar\hat{J}_y,\quad \hat{J}_y\hat{J}_z - \hat{J}_z\hat{J}_y = i\hbar\hat{J}_x$$

であるから，　$\hat{J}_z\hat{J}_x = \hat{J}_x\hat{J}_z + i\hbar\hat{J}_y$，　$\hat{J}_z\hat{J}_y = \hat{J}_y\hat{J}_z - i\hbar\hat{J}_x$　となり，これを(2-4-6)の右辺に代入すると，

$$\hat{J}_z(\hat{J}_x \pm i\hat{J}_y) = \hat{J}_x\hat{J}_z + i\hbar\hat{J}_y \pm (\hat{J}_y\hat{J}_z - i\hbar\hat{J}_x) = (\hat{J}_x \pm i\hat{J}_y)(\hat{J}_z \pm \hbar) \qquad (2\text{-}4\text{-}7)$$

が得られる．左右の演算子は等しい訳だから，これを ψ_{bc} に作用させた結果もやはり等しい，

$$\hat{J}_z(\hat{J}_x \pm i\hat{J}_y)\psi_{bc} = (\hat{J}_x \pm i\hat{J}_y)(\hat{J}_z \pm \hbar)\psi_{bc} = (\hat{J}_x \pm i\hat{J}_y)(c \pm \hbar)\psi_{bc} = (c \pm \hbar)(\hat{J}_x \pm i\hat{J}_y)\psi_{bc}$$

であり，結局，

$$\hat{J}_z(\hat{J}_x \pm i\hat{J}_y)\psi_{bc} = (c \pm \hbar)(\hat{J}_x \pm i\hat{J}_y)\psi_{bc} \qquad (2\text{-}4\text{-}8)$$

である．この両辺の右側に共通して $(\hat{J}_x \pm i\hat{J}_y)\psi_{bc}$ があるから，これが 0 でない限り，『$(\hat{J}_x \pm i\hat{J}_y)\psi_{bc}$ は $\hat{J}_z$ の固有関数であり，その固有値は $(c \pm \hbar)$ である』ことを意味している．

次に，$\hat{J}^2$ を $(\hat{J}_x \pm i\hat{J}_y)\psi_{bc}$ に作用させてみる，$\hat{J}^2$ は $\hat{J}_x$，$\hat{J}_y$　と可換であることに注意して，

$$\hat{J}^2(\hat{J}_x \pm i\hat{J}_y)\psi_{bc} = (\hat{J}_x \pm i\hat{J}_y)\hat{J}^2\psi_{bc} = b(\hat{J}_x \pm i\hat{J}_y)\psi_{bc} \qquad (2\text{-}4\text{-}9)$$

この等式は,『$(\hat{J}_x \pm i\hat{J}_y)\psi_{bc}$ は $\hat{J}^2$ の固有関数であり，その固有値は b である』ことを意味している．即ち,『$(\hat{J}_x \pm i\hat{J}_y)\psi_{bc}$ は，$\hat{J}^2$ と $\hat{J}_z$ の共通の固有関数で，その固有値は，各々，b と $(c \pm \hbar)$ である』.

そこで，(2-4-7)の $\hat{J}_z(\hat{J}_x \pm i\hat{J}_y) = (\hat{J}_x \pm i\hat{J}_y)(\hat{J}_z \pm \hbar)$ を $(\hat{J}_x \pm i\hat{J}_y)\psi_{bc}$ に作用させてみる,

$$\hat{J}_z(\hat{J}_x \pm i\hat{J}_y)(\hat{J}_x \pm i\hat{J}_y)\psi_{bc} = (\hat{J}_x \pm i\hat{J}_y)(\hat{J}_z \pm \hbar)(\hat{J}_x \pm i\hat{J}_y)\psi_{bc} \qquad (2\text{-}4\text{-}10)$$

ここで，右辺の $(\hat{J}_z \pm \hbar)(\hat{J}_x \pm i\hat{J}_y)\psi_{bc}$ に注目すると,

$$(\hat{J}_z \pm \hbar)(\hat{J}_x \pm i\hat{J}_y)\psi_{bc} = \hat{J}_z(\hat{J}_x \pm i\hat{J}_y)\psi_{bc} \pm \hbar(\hat{J}_x \pm i\hat{J}_y)\psi_{bc}$$

であり，右辺の第一項は，(2-4-8)が当てはまるから,

$$(\hat{J}_z \pm \hbar)(\hat{J}_x \pm i\hat{J}_y)\psi_{bc} = (c \pm \hbar)(\hat{J}_x \pm i\hat{J}_y)\psi_{bc} \pm \hbar(\hat{J}_x \pm i\hat{J}_y)\psi_{bc} = (c \pm 2\hbar)(\hat{J}_x \pm i\hat{J}_y)\psi_{bc}$$

である．従ってこれに $(\hat{J}_x \pm i\hat{J}_y)$ を左から作用させた結果が (2-4-10)の右辺となる．即ち,

$$\hat{J}_z(\hat{J}_x \pm i\hat{J}_y)(\hat{J}_x \pm i\hat{J}_y)\psi_{bc} = (c \pm 2\hbar)(\hat{J}_x \pm i\hat{J}_y)(\hat{J}_x \pm i\hat{J}_y)\psi_{bc} \qquad (2\text{-}4\text{-}11)$$

この等式は,

『$(\hat{J}_x \pm i\hat{J}_y)(\hat{J}_x \pm i\hat{J}_y)\psi_{bc}$ は $\hat{J}_z$ の固有関数であり，その固有値は $(c \pm 2\hbar)$ である』

ことを意味している．

$\hat{J}^2$ を左から $(\hat{J}_x \pm i\hat{J}_y)(\hat{J}_x \pm i\hat{J}_y)\psi_{bc}$ に作用させてみる．$\hat{J}^2$ は $\hat{J}_x$，$\hat{J}_y$ と可換であるから,

$$\hat{J}^2(\hat{J}_x \pm i\hat{J}_y)(\hat{J}_x \pm i\hat{J}_y)\psi_{bc}$$
$$= (\hat{J}_x \pm i\hat{J}_y)(\hat{J}_x \pm i\hat{J}_y)\hat{J}^2\psi_{bc} = b(\hat{J}_x \pm i\hat{J}_y)(\hat{J}_x \pm i\hat{J}_y)\psi_{bc} \qquad (2\text{-}4\text{-}9)$$

この等式は

『$(\hat{J}_x \pm i\hat{J}_y)(\hat{J}_x \pm i\hat{J}_y)\psi_{bc}$ は $\hat{J}^2$ の固有関数であり，その固有値は b である』

ことを意味している．即ち,

『$(\hat{J}_x \pm i\hat{J}_y)(\hat{J}_x \pm i\hat{J}_y)\psi_{bc}$ は，$\hat{J}^2$ と $\hat{J}_z$ の共通の固有関数で，その固有値は，各々，b と $(c \pm 2\hbar)$ である』.

以上のことから，次の結論が得られる,

『$\hat{J}^2$ と $\hat{J}_z$ の共通の固有関数が ψ_{bc} で，その固有値が，各々，b と c である時，ψ_{bc} に昇降演算子を m 回引き続き作用させて得られる関数は，やはり，$\hat{J}^2$ と $\hat{J}_z$ の共通の固有関数であり，$\hat{J}^2$ と $\hat{J}_z$ の固有値は，各々，b, $(c \pm m\hbar)$ である』.

この結果から，$\hat{J}_z$ の固有値に関して,

『$\hat{J}^2$ の固有値 b に対して，$\hat{J}_z$ の固有値 c は，c' をどれか一つの固有値とすると,

$$(\cdots, c'-2\hbar, c'-\hbar, c', c'+\hbar, c'+2\hbar, \cdots) \qquad \text{(A2-4-10)}$$

のような系列をなす.』

ことがわかる．しかし，(2-4-5)から，

$$c^2 \le b \qquad \text{(2-4-5)}$$

の制限があるので，$\hat{J}_z$の固有値の数は明らかに有限である．

そこで，最大の固有値を$c_{\max}$，その固有関数を$\psi_{bc\max}$，最小の固有値を$c_{\min}$，その固有関数を$\psi_{bc\min}$，とすると，

$$\begin{aligned}(\hat{J}_x + i\hat{J}_y)\psi_{bc\max} &= 0 \\ (\hat{J}_x - i\hat{J}_y)\psi_{bc\min} &= 0\end{aligned} \qquad \text{(2-4-11)}$$

でなければならない．最大の固有値$c_{\max}$を持つ固有関数に上昇演算子を作用させても，これより大きな固有値は存在しないからである．最小の固有値$c_{\min}$を持つ固有関数に下降演算子を作用させた場合も同じである．「梯子（はしご）は有限の段数しかない」訳である．

(2-4-11)に対し，昇降演算子に関する(2-3-7)を使う，

$$\begin{aligned}\hat{J}_+\hat{J}_- &= \hat{J}^2 - \hat{J}_z(\hat{J}_z - \hbar) \\ \hat{J}_-\hat{J}_+ &= \hat{J}^2 - \hat{J}_z(\hat{J}_z + \hbar)\end{aligned} \qquad \text{(2-3-7)}$$

(2-4-11)の第１式左辺に$\hat{J}_- = \hat{J}_x - i\hat{J}_y$を作用させれば，(2-3-7)の第２式が，また，(2-4-11)の第２式左辺に$\hat{J}_+ = \hat{J}_x + i\hat{J}_y$を作用させれば，(A2-3-7)の第１式が使える．従って，

$$\begin{aligned}(\hat{J}_x - i\hat{J}_y)(\hat{J}_x + i\hat{J}_y)\psi_{bc\max} &= (\hat{J}^2 - \hat{J}_z^2 - \hbar\hat{J}_z)\psi_{bc\max} = (b - c_{\max}^2 - \hbar c_{\max})\psi_{bc\max} = 0 \\ (\hat{J}_x + i\hat{J}_y)(\hat{J}_x - i\hat{J}_y)\psi_{bc\min} &= (\hat{J}^2 - \hat{J}_z^2 + \hbar\hat{J}_z)\psi_{bc\min} = (b - c_{\min}^2 + \hbar c_{\min})\psi_{bc\min} = 0\end{aligned}$$

これは，結局，

$$\begin{aligned}b - c_{\max}^2 - \hbar c_{\max} &= 0 \\ b - c_{\min}^2 + \hbar c_{\min} &= 0\end{aligned} \qquad \text{(2-4-12)}$$

これから b を消去して，整理すれば，

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

となる．従って，

$$c_{\max} = -c_{\min} \qquad or \qquad c_{\max} = |c_{\min}| \qquad \text{(2-4-13)}$$

(2-4-10)の固有値系列は，最小固有値$c_{\min}$の固有関数$\psi_{bc\min}$に上昇演算子を次々に作用させた結果えられる固有値系列に一致しているので，

$$(c_{\min}, c_{\min}+\hbar, c_{\min}+2\hbar, c_{\min}+3\hbar, \cdots\cdots, c_{\max}) \qquad (2\text{-}4\text{-}14)$$

と書ける．隣り合う固有値の間隔は，$\pm\hbar$　であるから，上昇演算子を作用させた回数を n とすれば，

$$c_{\min} + \mathrm{n}\hbar = c_{\max}$$

が成り立つ．(A2-4-13)の条件があるので，

$$\mathrm{c}_{\max} = (\frac{\mathrm{n}}{2})\hbar, \qquad \mathrm{c}_{\min} = -(\frac{\mathrm{n}}{2})\hbar$$

ここで，改めて，J=n/2　と置くと，

$$\mathrm{c}_{\max} = \mathrm{J}\hbar, \qquad \mathrm{c}_{\min} = -\mathrm{J}\hbar \qquad (2\text{-}4\text{-}15)$$

n は$c_{\min}$から$c_{\max}$に到るまで，上昇演算子を作用させた回数であるから，一般には，ゼロまたは正の整数である．従って，J はゼロまたは正の半整数（0,　1/2,　1,　3/2,・・・）である．n=２J であり，これは(2-4-14)の固有値系列に於ける間隔の数に対応している．従って，系列に含まれる固有値の総数は，初めの$c_{\min}$も加えて考えねばならないから，n＋1=2J＋1 である．

$c_{\min}$と$c_{\max}$が判ったので，(2-4-15)を(2-4-12)に代入すれば，$\hat{J}^2$の固有値bも J で表現できる，その結果は，

$$\mathrm{b} = \mathrm{c}_{\max}^2 + \hbar \mathrm{c}_{\max} = \mathrm{J}(\mathrm{J}+1)\hbar^2 \qquad (2\text{-}4\text{-}16)$$

以上をまとめると，

角運動量の２乗演算子（$\hat{J}^2$）と角運動量演算子の Z 成分（$\hat{J}_z$）

の同時固有関数が存在する時，

１）$\hat{J}^2$の固有値は$\mathrm{J}(\mathrm{J}+1)\hbar^2$で，J は角運動量の量子数で，

J＝0，1/2，1，3/2，・・・を取る．　(2-4-17)

２）$\hat{J}_z$の固有値は$\mathrm{m}\hbar$で，m＝-J，-J+1，-J+2，・・・，（J-1），J

であり，（2J＋1）個の異なる値を取る．

３）J が０又は整数である時は m＝0 が必ず含まれるが，

J が半整数である時は，m＝0 は含まれない．

大きな J では J（J＋1）≒J^2ではあるが，２乗と言いながら J（J＋1）であることに注意．

１中心１電子系における電子の角運動量演算子（$\hat{l}$），即ち，電子の軌道角運動の量子数をlとすると，その２乗演算子（$\hat{l}^2$）の固有値が$l(l+1)\hbar^2$であることになる．変数分離の際に(1-4-10)で，$\lambda = l(l+1)$としたことを思い起そう．これは，$\hbar^2$を単位に測った時の軌道角運動の２乗演算子の固有値である．

（2-5）固有関数の規格化と位相の約束

前節までの結論として，$\hat{J}^2$ の固有値が $j(j+1)\hbar^2$，$\hat{J}_z$ の固有値が $m\hbar$ である同時固有関数 $\psi_{j,m}$ が与えられた時，この $\psi_{j,m}$ に $\hat{J}_\pm = \hat{J}_x \pm \hat{J}_y$ を次々に作用させれば，$(2j+1)$ 個の異なる固有関数が得られることが判った．しかし，$\psi_{j,m}$ や $\psi_{j,m\pm1}$ などは規格化されておらず，

$$\hat{J}_\pm \psi_{j,m} = C(\pm)\psi_{j,m\pm1} \qquad (2\text{-}5\text{-}1)$$

であり，$C(\pm)$ の定数倍だけの任意性がある．$\psi_{j,m}$ や $\psi_{j,m\pm1}$ などが規格化されていることを条件に，定数 $C(\pm)$ をきめる必要がある．

$\psi_{j,m}$ が規格化されていとは，

$$\int \psi^*_{j,m}(\tau)\psi_{j,m}(\tau)d\tau \equiv \left\langle \psi_{j,m} \middle| \psi_{j,m} \right\rangle = 1 \qquad (2\text{-}5\text{-}2)$$

を意味する．$\psi_{j,m}$ の複素共役である $\psi^*_{j,m}$ と $\psi_{j,m}$ とを掛けて，$\tau = (\tau_1, \tau_2, \tau_3, \cdots)$ の全変数について積分したものが 1 であることを意味する．複素共役との積の積分はスカラー積と呼ばれる．$\langle \, | \, \rangle$ の表記法は Dirac, P. A. M. の考案したものである．$\psi_{j,m\pm1}$ が規格化されていることも，

$$\int \psi^*_{j,m\pm1}(\tau)\psi_{j,m\pm1}(\tau)d\tau \equiv \left\langle \psi_{j,m\pm1} \middle| \psi_{j,m\pm1} \right\rangle = 1 \qquad (2\text{-}5\text{-}3)$$

である．

(A2-5-1) $\hat{J}_\pm \psi_{j,m} = C(\pm)\psi_{j,m\pm1}$ の両辺のスカラー積を作ると．

$$\left\langle \hat{J}_\pm \psi_{j,m} \middle| \hat{J}_\pm \psi_{j,m} \right\rangle = C^2(\pm)\left\langle \psi_{j,m\pm1} \middle| \psi_{j,m\pm1} \right\rangle = C^2(\pm) \qquad (2\text{-}5\text{-}4)$$

右辺側は(2-5-3)を用いている．一方，左辺側は．

$$\left\langle \hat{J}_\pm \psi_{j,m} \middle| \hat{J}_\pm \psi_{j,m} \right\rangle = \left\langle \psi_{j,m} \middle| \hat{J}_\mp \hat{J}_\pm \psi_{j,m} \right\rangle \qquad (2\text{-}5\text{-}5)$$

となる．ここでは，$\hat{J}_\pm$ の「エルミート共役な演算子」は，$\hat{J}_\mp$ であることを使っている．この証明については，「エルミート共役な演算子」と「エルミート演算子」について解説が必要であるので，本節末尾にまとめて記しておく．

(2-5-5)の右辺に表れる $\hat{J}_\mp \hat{J}_\pm$ は，(A2-3-7)から $\hat{J}_\mp \hat{J}_\pm = \hat{J}^2 - \hat{J}_z(\hat{J}_z \pm \hbar)$ である．故に，

$$\hat{J}_\mp \hat{J}_\pm \psi_{j,m} = \hat{J}^2 \psi_{j,m} - \hat{J}_z^2 \psi_{j,m} \mp \hbar \hat{J}_z \psi_{j,m} = \hbar^2 (j \mp m)(j \pm m + 1)\psi_{j,m}$$

となり，(2-5-5)は，

$$\left\langle \hat{J}_{\pm}\psi_{j,m} \middle| \hat{J}_{\pm}\psi_{j,m} \right\rangle = \hbar^2 (j \mp m)(j \pm m + 1)\left\langle \psi_{j,m} \middle| \psi_{j,m} \right\rangle \tag{2-5-6}$$

であるから，(A2-5-4)より，

$$C^2(\pm) = \hbar^2 (j \mp m)(j \pm m + 1) \tag{2-5-6}$$

である．これから，$C(\pm)$は一般には複素数であることに注意して，

$$C(\pm) = e^{i\delta} \cdot \hbar\sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)} \tag{2-5-7}$$

となる．δは任意の実数で，$e^{i\delta}$は位相因子を表す．通常は$\delta = 0$として，$e^{i\delta} = 1$を約束して，

$$\hat{J}_{\pm}\psi_{j,m} = \hbar\sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)}\psi_{j,m\pm1} = \hbar\sqrt{j(j+1) - m(m \pm 1)}\psi_{j,m\pm1} \tag{2-5-8}$$

と表す．$\delta = 0$の選択はCondon and Shortly (1951) など多くの量子力学，原子分光学のテキストと一致しているが，著者によって（ランダウ・リフシッツなど）は$\delta \neq 0$の位相因子が採用されているので注意が必要である．

以上をまとめると，$\delta = 0$として，$e^{i\delta} = 1$を約束した場合，

$$\begin{aligned}
\hat{J}^2\psi_{j,m} &= j(j+1)\hbar^2\psi_{j,m} \\
\hat{J}_z\psi_{j,m} &= m\hbar\psi_{j,m} \\
\hat{J}_+\psi_{j,m} &= \sqrt{(j-m)(j+m+1)}\hbar\psi_{j,m+1} \\
\hat{J}_-\psi_{j,m} &= \sqrt{(j+m)(j-m+1)}\hbar\psi_{j,m-1}
\end{aligned} \tag{2-5-9}$$

となる．

「エルミート共役な演算子」と「エルミート演算子」

「エルミート共役な演算子」の定義は次の通りである．二つの演算子を$\hat{\mathrm{A}}, \hat{\mathrm{B}}$とし，$\varphi_1(\tau), \varphi_2(\tau)$を二つの関数とする時，

$$\int (\hat{A}\varphi_1(\tau))^* \varphi_2(\tau)d\tau = \int \varphi_1^*(\tau)\hat{B}\varphi_2(\tau)d\tau \tag{2-5-10}$$

が成立するなら，$\hat{\mathrm{B}}$は「$\hat{\mathrm{A}}$に対するエルミート共役な演算子」であると言う．「$\hat{\mathrm{A}}$に対するエルミート共役な演算子」は，$\hat{\mathrm{A}}^{\dagger}$のように，しばしば，$\hat{\mathrm{A}}$の上付きの短剣（ダガー）印で表される．(2-5-10)は，(2-5-2)のようなDiracの表記法を使うと，

$$\left\langle \hat{A}\varphi_1(\tau) \middle| \varphi_2(\tau) \right\rangle = \left\langle \varphi_1(\tau) \middle| \hat{B}\varphi_2(\tau) \right\rangle \tag{2-5-11}$$

である．演算子$\hat{\mathrm{A}}$，$\hat{\mathrm{B}}$を行列で考えると，$\hat{\mathrm{B}}$は「$\hat{\mathrm{A}}$を転置してその複素共役を取ったもの，即ち，$\hat{\mathrm{A}}$の転置共役行列」である．

一方，「$\hat{\mathrm{A}}$に対するエルミート共役な演算子」が$\hat{\mathrm{A}}$それ自身に等しい時，「$\hat{\mathrm{A}}$はエルミート演算子」であると呼ばれる．即ち，(2-5-10)，(2-5-11)は次のようになる，

$$\int (\hat{A}\varphi_1(\tau))^* \varphi_2(\tau) d\tau = \int \varphi_1^*(\tau) \hat{A}\varphi_2(\tau) dt \qquad (2\text{-}5\text{-}12)$$

$$\left\langle \hat{A}\varphi_1(\tau) \middle| \varphi_2(\tau) \right\rangle = \left\langle \varphi_1(\tau) \middle| \hat{A}\varphi_2(\tau) \right\rangle \qquad (2\text{-}5\text{-}13)$$

行列で考えると，「$\hat{\mathrm{A}}$の転置共役行列が$\hat{\mathrm{A}}$に等しい」場合に当たる．$\hat{\mathrm{A}}$はエルミート行列である．エルミート行列の固有値は実数である．量子力学では物理量（運動量，角運動量，H など）はすべてエルミート演算子であり，その具体的表現にはエルミート行列を用いることができる．これは量子力学の重要な前提である．

$\hat{\mathrm{A}}$，$\hat{\mathrm{B}}$がエルミート演算子なら，$\hat{\mathrm{C}}_+ = \hat{\mathrm{A}} + \mathrm{i}\hat{\mathrm{B}}$，$\hat{\mathrm{C}}_- = \hat{\mathrm{A}} - \mathrm{i}\hat{\mathrm{B}}$　は相互にエルミート共役な演算子であることを以下で確認する．これは，「$\hat{J}_\pm$のエルミート共役な演算子は，$\hat{J}_\mp$である」ことの証明である．

$$\left\langle \varphi_1(\tau) \middle| (\hat{A} + i\hat{B})\varphi_2(\tau) \right\rangle = \left\langle \varphi_1(\tau) \middle| \hat{A}\varphi_2(\tau) \right\rangle + i\left\langle \varphi_1(\tau) \middle| \hat{B}\varphi_2(\tau) \right\rangle$$

であるが，$\hat{\mathrm{A}}$，$\hat{\mathrm{B}}$はエルミート演算子でり，(2-5-12, 13)から，この右辺は

$\left\langle \hat{A}\varphi_1(\tau) \middle| \varphi_2(\tau) \right\rangle + i\left\langle \hat{B}\varphi_1(\tau) \middle| \varphi_2(\tau) \right\rangle$となる．この第２項は，

$$i\left\langle \hat{B}\varphi_1(\tau) \middle| \varphi_2(\tau) \right\rangle = i\int (\hat{B}\varphi_1(\tau))^* \varphi_2(\tau) d\tau = \int (-i\hat{B}\varphi_1(\tau))^* \varphi_2(\tau) d\tau = \left\langle -i\hat{B}\varphi_1(\tau) \middle| \varphi_2(\tau) \right\rangle$$

である．iを複素共役側に入れる為には，$-i$としなければならないことを意味しているに過ぎない．

$$\left\langle \varphi_1(\tau) \middle| (\hat{A} + i\hat{B})\varphi_2(\tau) \right\rangle = \left\langle \hat{A}\varphi_1(\tau) \middle| \varphi_2(\tau) \right\rangle + \left\langle -i\hat{B}\varphi_1(\tau) \middle| \varphi_2(\tau) \right\rangle = \left\langle (\hat{A} - i\hat{B})\varphi_1(\tau) \middle| \varphi_2(\tau) \right\rangle$$

となり，結局，

$$\left\langle (\hat{A} - i\hat{B})\varphi_1(\tau) \middle| \varphi_2(\tau) \right\rangle = \left\langle \varphi_1(\tau) \middle| (\hat{A} + i\hat{B})\varphi_2(\tau) \right\rangle \qquad (2\text{-}5\text{-}14)$$

が得られる．これと，エルミート共役演算子の定義(2-5-10)と比べれは，

$\hat{C}_+ = \hat{A} + i\hat{B}$ と $\hat{C}_- = \hat{A} - i\hat{B}$ が，相互にエルミート共役な演算子であることがわかる．

「角運動量演算子の行列表示」

演算子は行列で表現されると述べたので，その例として，角運動量演算子を行列で表現することを述べ補足とする．

$\delta=0$として，$e^{i\delta}=1$を約束した場合，

$$\begin{aligned}
&\hat{J}^2\psi_{j,m}=j(j+1)\hbar^2\psi_{j,m}\\
&\hat{J}_z\psi_{j,m}=m\hbar\psi_{j,m}\\
&\hat{J}_+\psi_{j,m}=\sqrt{(j-m)(j+m+1)}\hbar\psi_{j,m+1}\\
&\hat{J}_-\psi_{j,m}=\sqrt{(j+m)(j-m+1)}\hbar\psi_{j,m-1}
\end{aligned} \qquad (2\text{-}5\text{-}9)$$

であった．

正規直交系をなす$\psi_{j,m}$は，$m=j, j-1, j-2,\cdots\cdots,\ -(j-2),\ -(j-1),\ -j$ の(2j+1)個の関数からなるとすると，(A2-5-9)の各等式の両辺に$\psi^*{}_{j,m'}$を掛けて積分し，$\psi_{j,m}$が正規直交系をなすことを使うと，

$$\begin{aligned}
&\left\langle\psi_{j,m'}\middle|\hat{J}^2\middle|\psi_{j,m}\right\rangle=j(j+1)\hbar^2\delta_{m',m}\\
&\left\langle\psi_{j,m'}\middle|\hat{J}_z\middle|\psi_{j,m}\right\rangle=m\hbar\delta_{m',m}\\
&\left\langle\psi_{j,m'}\middle|\hat{J}_+\middle|\psi_{j,m}\right\rangle=\sqrt{(j-m)(j+m+1)}\hbar\delta_{m',m+1}\\
&\left\langle\psi_{j,m'}\middle|\hat{J}_-\middle|\psi_{j,m}\right\rangle=\sqrt{(j+m)(j-m+1)}\hbar\delta_{m',m-1}
\end{aligned} \qquad (2\text{-}5\text{-}15)$$

となる．これらの結果を行列要素として表すことができる．このような行列を各演算子の表現行列と言う．$\hat{J}^2,\hat{J}_z$の場合は対角行列，$\hat{J}_\pm$の場合は非対角行列となることは直ぐにわかる．

行列要素が得られることは良いが，それを要素とする行列が，何故，ブラとケットで挟まれている演算子自体を表現する行列になるのだろうか？　まずこの点から考える．

正規直交系をなす関数系$\phi_n (n=1,2,\cdots,N)$を考える．これは，

$$\left\langle\phi_m\middle|\phi_n\right\rangle=\int_x\phi^*{}_m\cdot\phi_n dx=\delta_{m,n} \qquad (2\text{-}5\text{-}16)$$

任意のϕを考え，この関数は正規直交関数系$\phi_n (n=1,2,\cdots,N)$の重ね合わせで表現できるとする．即ち，$\phi_n (n=1,2,\cdots,N)$で展開できるとする．a_nを「重ね合わせ」係数あるいは「展開」係数として，任意のϕは，

$$\phi=\sum_{n=1}^{N}a_n\phi_n \qquad (2\text{-}5\text{-}17)$$

である．この係数a_nは，(2-5-16)より，次のスカラー積で決まる．

$$\left\langle \phi_m \middle| \phi \right\rangle = \left\langle \phi_m \middle| \sum_{n=1}^{N} a_n \phi_n \right\rangle = \sum_{n=1}^{N} a_n \int_x \phi^*{}_m \cdot \phi_n dx = a_m \tag{2-5-18}$$

係数a_nが決まることは，任意のϕが決まることである．一方，演算子$\hat{A}$をこのϕに作用させた結果は，$\hat{A}\phi$も$\phi_n (n = 1,2,\cdots,N)$で展開できるとして，

$$\hat{A}\phi = \sum_{n=1}^{N} b_n \phi_n \tag{2-5-19}$$

a_nの場合と同じように，b_nを決めれば$\hat{A}\phi$が決まったことになる．これは，

$$\left\langle \phi_m \middle| \hat{A}\phi \right\rangle = \left\langle \phi_m \middle| \sum_{n=1}^{N} b_n \phi_n \right\rangle = \sum_{n=1}^{N} b_n \int_x \phi^*{}_m \cdot \phi_n dx = b_m \tag{2-5-20}$$

である．従って，演算子$\hat{A}$をϕに作用させることは，係数a_n→係数b_nに変更することであり，演算子$\hat{A}$の内容が決まることになる．「係数a_nを成分とするベクトル」を「係数b_nを成分とするベクトル」に変更するのが，演算子$\hat{A}$の働きであると思えば良い．ところで，(2-5-17)の両辺に$\hat{A}$を作用させると，a_nは単なる係数であるから，

$$\hat{A}\phi = \sum_{n=1}^{N} a_n \hat{A}\phi_n \tag{2-5-21}$$

である．これに対し，(2-5-20)と同じスカラー積を作ると，

$$\begin{aligned} b_m &= \left\langle \phi_m \middle| \hat{A}\phi \right\rangle = \left\langle \phi_m \middle| \sum_{n=1}^{N} a_n \hat{A}\phi_n \right\rangle = \int_x \phi^*{}_m \cdot \left(\sum_{n=1}^{N} a_n \hat{A}\phi_n\right) dx \\ &= \sum_{n=1}^{N} a_n \left(\int_x \phi^*{}_m \cdot \hat{A}\phi_n dx\right) = \sum_{n=1}^{N} \left\langle \phi_m \middle| \hat{A}\phi_n \right\rangle a_n = \sum_{n=1}^{N} (\hat{A})_{m,n} a_n \end{aligned} \tag{2-5-22}$$

最後のところで，

$$(\hat{A})_{m,n} \equiv \left\langle \phi_m \middle| \hat{A}\phi_n \right\rangle = \int_x \phi^*{}_m \hat{A}\phi_n dx \equiv \left\langle \phi_m \middle| \hat{A} \middle| \phi_n \right\rangle \tag{2-5-23}$$

として行列要素を定義し，用いていることに注意．この(2-5-22)は，演算子$\hat{A}$がϕに作用することによって，「係数a_nを成分とするベクトル」が「係数b_nを成分とする新たなベクトル」に変わることを指定している．従って，(2-5-23)を要素とする行列が，演算子$\hat{A}$を表現していることになる．同様にして，(2-5-15)の行列要素から得られる行列は，各演算子の行列表現となる．

(2-5-15)の行列要素を定める場合は，行は m'で指定し，第 1 行が m'＝j，第 2 行が m'＝j-1,・・・，とする．　列は m で指定し，第 1 列が m＝j，第 2 列が m=j-1,　・・・，とする．　従って，$\hat{A}$を演算子として，

$$
\begin{array}{c c}
 & \begin{array}{cccc} m=j, & m=j-1, & \cdot\,, & m \end{array} \\
\begin{array}{c} m'=j \\ m'=j-1 \\ \cdot \\ m' \end{array} &
\begin{pmatrix}
\langle \psi_{j,j} | \hat{A} | \psi_{j,j} \rangle & \langle \psi_{j,j} | \hat{A} | \psi_{j,j-1} \rangle & \cdot & \cdot \\
\langle \psi_{j,j-1} | \hat{A} | \psi_{j,j} \rangle & \langle \psi_{j,j-1} | \hat{A} | \psi_{j,j-1} \rangle & \cdot & \cdot \\
\cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\
\cdot & \cdot & \cdot & \langle \psi_{j,m'} | \hat{A} | \psi_{j,m} \rangle
\end{pmatrix}
\end{array}
\qquad (2\text{-}5\text{-}24)
$$

である．

j=1/2 の場合は，m，m’=-1/2，+1/2 であるから，各演算子の表現行列は，以下のような，（２行２列）の行列になる．

$$\left(\hat{J}^2\right) = \langle 1/2, m' | \hat{J}^2 | 1/2, m \rangle = \hbar^2 \begin{pmatrix} 3/4 & 0 \\ 0 & 3/4 \end{pmatrix} = \hbar^2 \frac{1}{2} \cdot (\frac{1}{2}+1) \cdot E$$

$$\left(\hat{J}_z\right) = \langle 1/2, m' | \hat{J}_z | 1/2, m \rangle = \hbar^2 \begin{pmatrix} 1/2 & 0 \\ 0 & -1/2 \end{pmatrix} = \hbar \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \hbar \frac{1}{2} \sigma_z$$

$$\left(\hat{J}_+\right) = \langle 1/2, m' | \hat{J}_+ | 1/2, m \rangle = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\left(\hat{J}_-\right) = \langle 1/2, m' | \hat{J}_- | 1/2, m \rangle = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

昇降演算子の定義(2-3-3)から，$\hat{J}_x = (\frac{1}{2})(\hat{J}_+ + \hat{J}_-)$,　$\hat{J}_y = (\frac{1}{2i})(\hat{J}_+ - \hat{J}_-)$　であるから，

$$\left(\hat{J}_x\right) = \langle 1/2, m' | \hat{J}_x | 1/2, m \rangle = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1/2 \\ 1/2 & 0 \end{pmatrix} = \hbar \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \hbar \frac{1}{2} \sigma_x$$

$$\left(\hat{J}_y\right) = \langle 1/2, m' | \hat{J}_y | 1/2, m \rangle = \hbar \begin{pmatrix} 0 & -i/2 \\ i/2 & 0 \end{pmatrix} = \hbar \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} = \hbar \frac{1}{2} \sigma_y$$

となる．j=1/2 の場合は，後に述べるスピン角運動量に相当する．σ_x，σ_y，σ_zと書いた（２行２列）行列は Pauli 行列と呼ばれ，スピン角運動量の x，y，z 成分の行列表現に使われる．

j＝１の場合，m，m’=-1, 0, +1 であるから，各演算子の表現行列は（3 行 3 列）の行列となる．(2-5-16)に従って，j=1/2 の場合のようにやれば良い．

（2-6）極座標系で表現した角運動量演算子

前節までの軌道角運動量は，直交座標系を用いて，

$$\hat{l}_x = \frac{\hbar}{i}(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}),\ \ \hat{l}_y = \frac{\hbar}{i}(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}),\ \ \hat{l}_z = \frac{\hbar}{i}(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}) \qquad \text{(2-2-1)}$$

と書いてきたが，ここではこれを極座標系で表す．(A1-3)において既に，

$x, y, z, \frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z}$ を極座標系で表現しているので，これらの結果である

(1-3-1)と(1-3-10)を (2-2-1)に代入すれば良い．その結果は以下の通りである，

$$\begin{aligned}
\hat{l}_x &= i\hbar(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta} + \cot\theta\cos\phi\frac{\partial}{\partial\phi}) \\
\hat{l}_y &= i\hbar(-\cos\theta\frac{\partial}{\partial\theta} + \cot\theta\sin\phi\frac{\partial}{\partial\phi}) \qquad \text{(2-6-1)} \\
\hat{l}_z &= -i\hbar\frac{\partial}{\partial\phi}
\end{aligned}$$

最後の$\hat{l}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\phi}$は実に単純である．これにより昇降演算子の極座標表現は，

$$\hat{l}_\pm = \hbar e^{\pm i\phi}(\pm\frac{\partial}{\partial\theta} + i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\phi}) \qquad \text{(2-6-2)}$$

となる．これから，

$$\hat{l}_-\hat{l}_+ = -\hbar^2(\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \cot\theta\frac{\partial}{\partial\theta} - i\frac{\partial}{\partial\phi} + \cot^2\theta\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}) \qquad \text{(2-6-3)}$$

であることが判る．

一方，一般の角運動量$\hat{J}$に関する昇降演算子の性質として，(2-3-7)を思い起そう，

$$\begin{aligned}
\hat{J}_+\hat{J}_- &= \hat{J}^2 - \hat{J}_z(\hat{J}_z - \hbar) \\
\hat{J}_-\hat{J}_+ &= \hat{J}^2 - \hat{J}_z(\hat{J}_z + \hbar)
\end{aligned} \qquad \text{(2-3-7)}$$

従って，軌道角運動量に関して，$\hat{J}_-\hat{J}_+ = \hat{J}^2 - \hat{J}_z(\hat{J}_z + \hbar)$は，$\hat{l}_-\hat{l}_+ = \hat{l}^2 - \hat{l}_z(\hat{l}_z + \hbar)$となるから，$\hat{l}_-\hat{l}_+ = \hat{l}^2 - \hat{l}_z(\hat{l}_z + \hbar) = \hat{l}^2 - \hat{l}^2{}_z - \hbar\hat{l}_z$である．これから

$$\hat{l}^2 = \hat{l}_-\hat{l}_- + \hat{l}^2{}_z + \hbar\hat{l}_z \qquad \text{(2-6-4)}$$

ここに，(2-6-3)，(2-6-1)を代入すれば，$\hat{l}^2$ の極座標表現が得られる．

$$\hat{l}^2 = -\hbar^2\{\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\} \qquad \text{(2-6-5)}$$

既に，一般の角運動量$\hat{J}$に関して$\hat{J}^2$の固有値は，(2-4-17)で$J(J+1)\hbar^2$であることを確認している．従って，$\hat{l}^2$の固有値は$l(l+1)\hbar^2$である．故に，

$$\hat{l}^2\psi_{l,m} = -\hbar^2\{\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\}\psi_{l,m} = l(l+1)\hbar^2\psi_{l,m} \qquad (2\text{-}6\text{-}6)$$

である．これは，$\psi_{l,m}(\theta,\phi) = Y(\theta,\phi)$とすれば変数分離の際に仮定した(A1-4-9)であり，角度方程式の解$Y(\theta,\phi)$が，$\hat{l}^2$と$\hat{l}_z$の共通の固有関数である$\psi_{l,m}(\theta,\phi)$そのものである．

次に，$\hat{l}^2$と$\hat{l}_z$の共通の固有関数である$Y_{l,m}(\theta,\phi) = \psi_{l,m}(\theta,\phi)$を具体的に求めることを考えることになるが，その前に，$\hat{H}, \hat{l}^2, \hat{l}_z$　の関係について考えておく．

「中心力場における１粒子の$\hat{H}, \hat{l}^2, \hat{l}_z$は可換」

$\hat{l}^2$に対する(A2-6-5)を(A1-3-3)のΔに代入すれば，ラプラス演算子の極座標表現は，

$$\Delta = \nabla^2 = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}(r^2\frac{\partial}{\partial r}) - \frac{\hat{l}^2}{r^2\hbar^2} \qquad (2\text{-}6\text{-}7)$$

従って，(1-2-2)の Schödinger 方程式の$\hat{H}$は，m を電子の換算質量として，

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}(r^2\frac{\partial}{\partial r}) + \frac{\hat{l}^2}{2mr^2} + V(r) \qquad (2\text{-}6\text{-}8)$$

となる．これから，$\hat{H}, \hat{l}^2, \hat{l}_z$が相互に可換であること，

$$\left[\hat{l}_z, \hat{H}\right] = 0,\ \left[\hat{l}^2, \hat{H}\right] = 0 \qquad (2\text{-}6\text{-}9)$$

がわかる．$[\hat{l}_z, \hat{l}^2] = 0$であることは既に見ている．　$[\hat{l}_z, \hat{H}] = \hat{l}_z\hat{H} - \hat{H}\hat{l}_z$　を作った時，(2-6-8)の第一項と第三項は変数 r のみに関係し，$\hat{l}_z$　の角度変数とは独立であるから，演算子の積は順序を入れ替えても同じ結果を与え，両者は$\hat{l}_z$と可換である．第二項は$f(r)\hat{l}^2$の形でなっているが，$\hat{l}_z$は角度変数のみによるので，r の関数が付いていても積の順序に依らない．また，$[\hat{l}_z, \hat{l}^2] = 0$であるから第２項も$\hat{l}_z$と可換である．従って，$[\hat{l}_z, \hat{H}] = 0$である．同様にして，$[\hat{l}_x, \hat{H}] = 0$, $[\hat{l}_y, \hat{H}] = 0$となる．$[\hat{l}^2, \hat{H}] = \hat{l}^2\hat{H} - \hat{H}\hat{l}^2$の場合も，(2-6-8)の第一項と第三項が$\hat{l}^2$と可換であることは，$\hat{l}_z$の場合と同じである．第三項の場合も，同一演算子の交換子が０となるのは自明であるから，$[\hat{l}^2, \hat{l}^2] = 0$である．従って，$[\hat{l}^2, \hat{H}] = \hat{l}^2\hat{H} - \hat{H}\hat{l}^2 = 0$である．

以上のように，$\hat{H}, \hat{l}^2, \hat{l}_z$は相互に可換であるから，電子のエネルギー固有関数，即ち，$\hat{H}$の固有関数は，$\hat{l}^2, \hat{l}_z$　と共通の固有関数を用いて表すことができる．$\hat{H}$

の固有関数は$\psi(r,\theta,\phi) = R(r)Y(\theta,\phi) = (1/r)P(r)Y(\theta,\phi)$であるとしている．$\hat{l}^2$, $\hat{l}_z$と共通の固有関数は$Y(\theta,\phi) = Y_{l,m}(\theta,\phi) = \psi_{l,m}(\theta,\phi)$であるが，$(\theta,\phi)$から見ると$R(r) = (1/r)P(r)$は単なる定数であり，確かに$\psi(r,\theta,\phi) = R(r)Y(\theta,\phi)$は，$\hat{H}$, $\hat{l}^2$, $\hat{l}_z$に共通の固有関数である．「中心力場における１粒子の角運動量保存則」は，量子力学にあっては，「$\hat{H}$, $\hat{l}^2$, $\hat{l}_z$は可換で共通の同時固有関数を持つ」という形なる．「中心力場における多粒子の全角運動保存則」も同じような形，「多粒子系の$\hat{H}$と$\hat{L}^2$, $\hat{L}_z$は可換で共通の同時固有関数を持つ」となる．多電子子系の$\hat{H}$は§11で述べることになるが，基本的には，１電子の$\hat{H}$の和に電子間の反発エネルギーの和を加えたものとなる．従って，上記の考え方で理解できる．

(2-7)　$\hat{l}^2, \hat{l}_z$ の同時固有関数 $Y_{l,m}(\theta,\phi)$：その求め方

一般的な角運動量 $\hat{J}$ について，(2-5-9)で，$\hat{J}^2$ と $\hat{J}_z$ の同時固有関数，昇降演算子の関係式を得ている．これら演算子の極座標表現は(2-6)で得た．$\hat{J}$ を $\hat{l}$ に置き換えれば，$\hat{l}^2, \hat{l}_z$ の同時固有関数 $Y_{l,m}(\theta,\phi)$ が満足すべき関係式が得られる．

$$
\begin{aligned}
&\hat{l}^2 Y_{l,m} = l(l+1)\hbar^2 Y_{l,m} \\
&\hat{l}_z Y_{l,m} = m\hbar Y_{l,m} \\
&\hat{l}_+ \psi_{l,m} = \sqrt{(l-m)(l+m+1)}\hbar Y_{l,m+1} \\
&\hat{l}_- \psi_{l,m} = \sqrt{(l+m)(l-m+1)}\hbar Y_{l,m-1}
\end{aligned}
\tag{2-7-1}
$$

$Y_{l,m}(\theta,\phi)$ の具体的関数形は，特別な m の値 $(m = \pm l,\ 0)$ を持つ $Y_{l,m}(\theta,\phi)$ に昇降演算子を繰り返し作用させることから求められる．

まず，$\hat{l}_z Y_{l,m} = m\hbar Y_{l,m}$ から考える．$\hat{l}_z$ の極座標表現は(2-6)にあるように簡単で，

$$
\hat{l}_z Y_{l,m} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial\phi} Y_{l,m}(\theta,\phi) = m\hbar Y_{l,m}(\theta,\phi)
$$

となる．これは，

$$
\frac{\partial}{\partial\phi} Y_{l,m}(\theta,\phi) = \frac{-1}{i} m Y_{l,m}(\theta,\phi) = im Y_{l,m}(\theta,\phi) \tag{2-7-2}
$$

この微分方程式は，$Y_{l,m}(\theta,\phi)$ が次のような関数であることを意味している．

$$
Y_{l,m}(\theta,\phi) = e^{im\phi} \cdot g_{l,m}(\theta) = e^{im\phi} \cdot f_{l,m}(\cos\theta) \tag{2-7-3}
$$

$0 \le \theta \le \pi$ では，θ と $\cos\theta$ は一対一に対応するから，$\cos\theta$ を変数に取っても良い．ただし，$f_{l,m}(\cos\theta)$ は定数も含めて考える．

$m = \pm l$ は最大および最小の m であるので，これら $Y_{l,\pm l}$ は特別なものである．(2-4)で見たように，$Y_{l,l}$ に上昇演算子を作用させた結果は 0 であり，$Y_{l,-l}$ に下降演算子をさせた結果も 0 である．昇降演算子は(A2-6-2)から，

$$
\hat{l}_\pm = \hbar e^{\pm i\phi}\left(\pm\frac{\partial}{\partial\theta} + i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\phi}\right)
$$

であるから，(2-7-3)を用いて，

$$
\hat{l}_+ Y_{l,l} = \hbar e^{+i\phi}\left(\frac{\partial}{\partial\theta} + i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\phi}\right)[e^{il\phi} f_{l,l}(\cos\theta)] = \hbar e^{+i(l+1)\phi}\left(\frac{\partial\partial}{\partial\theta} - \mathrm{l}\cot\theta\right)\mathrm{f}_{\mathrm{l,l}}(\cos\theta) = 0
$$

となる．これは，

$$
\left(\frac{d}{d\theta} - l\cot\theta\right) f_{l,l}(\cos\theta) = 0 \tag{2-7-4}
$$

である．この解は，C_lを定数として，

$$f_{l,l}(\cos\theta) = C_l(\sin\theta)^l \qquad (2\text{-}7\text{-}5)$$

である．(2-7-4)左辺に代入して微分してみれば判る．即ち，

$$Y_{l,l} = C_l \cdot e^{il\phi} \cdot (\sin\theta)^l \qquad (2\text{-}7\text{-}6)$$

である．$Y_{l,-l}$に下降演算子を作用させた場合も同様にして，

$$Y_{l,-l} = C_{-l} \cdot e^{-il\phi} \cdot (\sin\theta)^l \qquad (2\text{-}7\text{-}7)$$

との結果が得られる．

(2-7-3)で m＝０とした場合の

$$Y_{l,0}(\theta,\phi) = f_{l,0}(\cos\theta) \qquad (2\text{-}7\text{-}8)$$

も特別な固有関数である．この関数を求めるには，$Y_{l,0}(\theta,\phi) = f_{l,0}(\cos\theta)$　が$\hat{l}^2$の固有関数であることを使う．$\hat{l}^2$は，

$$\hat{l}^2 = -\hbar^2\{\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\} \qquad (2\text{-}6\text{-}5)$$

であるが，(2-7-3)はϕを含んでいないから，ϕに関する微分は０であり，

$$\hat{l}^2 Y_{l,0} = -\hbar^2\{\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta})\}f_{l,0}(\cos\theta) = l(l+1)\hbar^2 f_{l,0}(\cos\theta)$$

となる．これは一変数の微分方程式であるから，常微分方程式になる．また，$g(\theta) = f(\cos\theta)$に対して両辺を$\theta$で微分すれば，

$\dfrac{dg}{d\theta} = \dfrac{df}{d(\cos\theta)}\cdot\dfrac{d(\cos\theta)}{d\theta} = -\sin\theta\cdot\dfrac{df}{d(\cos\theta)}$　で，$\dfrac{d}{d\theta} = -\sin\theta\cdot\dfrac{d}{d(\cos\theta)}$であることに注意して整理すれば，

$$\{\frac{d}{d\cos\theta}(\sin^2\theta\frac{d}{d\cos\theta}) + l(l+1)\}f_{l,0}(\cos\theta) = 0$$

となる．ここで，$z \equiv \cos\theta$　とすると，

$$\{\frac{d}{dz}(1-z^2)\frac{d}{dz}) + l(l+1)\}f_{l,0}(z) = 0 \qquad (2\text{-}7\text{-}9)$$

この微分方程式は Legendre（ルジャンドル）の微分方程式と呼ばれる．この解は，l次の Legendre（ルジャンドル）の多項式で，$P_l(z)$と表記される．$P_l(z)$は z に関するl次の多項式であり，$P_l(1) = 1$が成立している．$P_l(z)$の具体的求め方は，ここでは述べない，§3 に記す．

以上の$Y_{l,l}$，$Y_{l,-l}$，Y_{l0}　からどれかを選び，これに昇降演算子を繰り返して作用させれば，全ての$Y_{l,m}$が具体的に求められる．$Y_{l,l}$を選んだ場合は下降演算子を，

$Y_{l,-l}$を選んだ場合は，上昇演算子を続けて作用させる．$Y_{l,0}$から始める場合は，上昇演算子を続けて作用させて$Y_{l,l}$までを求め，$Y_{l,-l}$までは下降演算子を作用させることになる． $Y_{l,l}$，$Y_{l,-l}$，$Y_{l,0}$の何れを選んでも，昇降演算子（$\hat{l}_{\pm}$）を繰り返し作用させた場合の一般式を予め求めておくと便利である．次にこれを求める．

（2-8）昇降演算子の繰り返し利用と軌道角運動量の量子数

軌道角運動量に対し，(2-7-1)より，昇降演算子は，

$$\hat{l}_{\pm} Y_{l,m} = \sqrt{(l \mp m)(l \pm m+1)}\hbar Y_{l,m\pm 1}$$

であったから，左右を逆に書いて，

$$Y_{l,m\pm 1} = \frac{1}{\sqrt{(l \mp m)(l \pm m+1)}} \cdot \frac{1}{\hbar} \cdot \hat{l}_{\pm} Y_{l,m} \qquad (2\text{-}8\text{-}1)$$

$Y_{l,m\pm 1}$, $Y_{l,m\pm 2}$, $Y_{l,m\pm 3}$, ⋯⋯, $Y_{l,m\pm k}$ を順次求めてゆくことは，係数は別とすれば，$\hat{l}_{\pm}$ を k 回繰り返して作用させることになる．そのような $\hat{l}_{\pm}$ を k 回繰り返した場合を $(\hat{l}_{\pm})^k$ で表し，この具体的表現を求める．

固有関数は

$$Y_{l,\mu} = e^{i\mu\phi} \cdot f_{l,\mu}(\cos\theta) \qquad (2\text{-}8\text{-}2)$$

と書き，これに $\hat{l}_{\pm}$ を作用させる．昇降演算子の極座標表現は，

$$\hat{l}_{\pm} = \hbar e^{\pm i\phi}\left(\pm\frac{\partial}{\partial\theta} + i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\phi}\right) \qquad (2\text{-}6\text{-}2)$$

である． (2-8-2)で変数を $\cos\theta$ にしているので，(2-6-2)で $\partial/\partial\theta \to \partial/\partial\cos\theta$ としておかねばならない．これは，既に，(2-3-9)のルジャンドルの微分方程式を得る際にやっている．偏微分も微分も同じであるから，

$$\frac{\partial}{\partial\theta} = -\sin\theta \cdot \frac{\partial}{\partial(\cos\theta)} \qquad (2\text{-}8\text{-}3)$$

もう一つの注意は，(2-6-2)の $\cot\theta$ を書き直すことである，

$$\frac{\partial(\sin\theta)}{\partial(\cos\theta)} \equiv \frac{\partial\sin\theta}{\partial\cos\theta} = -\frac{\cos\theta}{\sin\theta} = -\cot\theta \qquad (2\text{-}8\text{-}4)$$

これは，$\cos^2\theta + \sin^2\theta = 1$ の両辺を θ で微分すると得られる．(2-8-3)と(2-8-4)を使って，$\hat{l}_{\pm}$ は，

$$\hat{l}_{\pm} = \hbar e^{\pm i\phi}\left(\mp\sin\theta\frac{\partial}{\partial\cos\theta} - i\frac{\partial\sin\theta}{\partial\cos\theta}\frac{\partial\partial}{\partial\phi}\right) \qquad (2\text{-}8\text{-}5)$$

となる．この $\hat{l}_{\pm}$ を(2-8-2)の $Y_{l,\mu} = e^{i\mu\phi} \cdot f_{l,\mu}(\cos\theta)$ に作用させてみる，

$$\begin{aligned}\hat{l}_{\pm} Y_{l,\mu} &= \hbar e^{\pm i\phi}\left(\mp\sin\theta\frac{\partial}{\partial\cos\theta} - i\frac{\partial\sin\theta}{\partial\cos\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\right)[e^{i\mu\phi} \cdot f_{l,\mu}(\cos\theta)] \\ &= \hbar e^{\pm i\phi}\left\{\mu \cdot \frac{\partial\sin\theta}{\partial\cos\theta} \mp \sin\theta \cdot \frac{\partial}{\partial\cos\theta}\right\} \cdot [e^{i\mu\phi} \cdot f_{l,\mu}(\cos\theta)]\end{aligned} \qquad (2\text{-}8\text{-}6)$$

となる．

$\hat{l}_+$ の場合について，(2-8-6)右辺の$\{\mu\cdot\frac{\partial\sin\theta}{\partial\cos\theta}-\sin\theta\cdot\frac{\partial}{\partial\cos\theta}\}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mu\phi}f_{l,\mu}(\cos\theta)$だけを考え，$(-\sin^{1+\mu}\theta)$を括り出すと，

$$(-\sin^{1+\mu}\theta)\{-\mu\cdot\sin^{-\mu-1}\theta\cdot\frac{\partial\sin\theta}{\partial\cos\theta}+\sin^{-\mu}\theta\cdot\frac{\partial}{\partial\cos\theta}\}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mu\phi}f_{l,\mu}(\cos\theta)$$

$$=(-\sin^{1+\mu}\theta)\{\frac{\partial}{\partial\cos\theta}(sin^{-\mu}\theta)+\sin^{-\mu}\theta\cdot\frac{\partial}{\partial\cos\theta}\}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mu\phi}f_{l,\mu}(\cos\theta)$$

$$=(-\sin^{1+\mu}\theta)\frac{\partial}{\partial\cos\theta}\{(sin^{-\mu}\theta)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mu\phi}f_{l,\mu}(\cos\theta)\}$$

となる．従って，$\hat{l}_+$ の場合，

$$\hat{l}_+Y_{l,\,\mu}=\hbar\cdot(-e^{i\phi})\cdot(\sin^{1+\mu}\theta)\frac{\partial}{\partial\cos\theta}\{(\sin^{-\mu}\theta)\cdot e^{i\mu\phi}\cdot f_{l,\,\mu}(\cos\theta)\}\qquad(2\text{-}8\text{-}7)$$

である．

$\hat{l}_-$ の場合について，同様に考えれば(2-8-7)に類似の結果が得られる．その結果は,

$$\hat{l}_-Y_{l,\,\mu}=\hbar\cdot(e^{-i\phi})\cdot(\sin^{1-\mu}\theta)\frac{\partial}{\partial\cos\theta}\{(\sin^{+\mu}\theta)\cdot e^{i\mu\phi}\cdot f_{l,\,\mu}(\cos\theta)\}$$

両者を合せて書けば,

$$\hat{l}_\pm Y_{l,\,\mu}=\hbar\cdot(\mp e^{-i\phi})\cdot(\sin^{1\pm\mu}\theta)\frac{\partial}{\partial\cos\theta}\{(\sin^{\mp\mu}\theta)\cdot e^{i\mu\phi}\cdot f_{l,\,\mu}(\cos\theta)\}\qquad(2\text{-}8\text{-}8)$$

となる．演算子$\hat{l}_\pm$だけで書くと,

$$\hat{l}_\pm(\mu)=\hbar\cdot(\mp e^{-i\phi})\cdot(\sin^{1\pm\mu}\theta)\frac{\partial}{\partial\cos\theta}(\sin^{\mp\mu}\theta)\qquad(2\text{-}8\text{-}9)$$

となるが，以下の２点，注意が必要である．一つは，(2-8-8)と比べれば判るように，$(\sin^{\mp\mu}\theta)$を掛けてから演算すること，$\hat{l}_\pm$が$Y_{l,\,\mu}=e^{i\mu\phi}\cdot f_{l,\,\mu}(\cos\theta)$ の μ に依存していることである． $\hat{l}_+$をｋ回繰り返して作用させることは,

$$(\hat{l}_+)^k[e^{i\mu\phi}\cdot f_{l,\mu}(\cos\theta)]=\hat{l}_+(\mu+k-1)\cdot\hat{l}_+(\mu+k-2)\cdots\hat{l}_+(\mu+1)\cdot\hat{l}_+(\mu)\cdot[e^{i\mu\phi}\cdot f_{l,\mu}(\cos\vartheta)]$$

である．また，$\hat{l}_-$をｋ回繰り返して作用させることは,

$$(\hat{l}_-)^k[e^{i\mu\phi}\cdot f_{l,\mu}(\cos\theta)]=\hat{l}_-(\mu-k+1)\cdot\hat{l}_-(\mu-k+2)\cdots\hat{l}_-(\mu-1)\cdot\hat{l}_-(\mu)\cdot[e^{i\mu\phi}\cdot f_{l,\mu}(\cos\vartheta)]$$

となる．

ｋ=1 の場合は(2-8-9)であるから，ｋ=２の場合を求め，一般の繰り返し回数がｋである場合は，帰納法的に求められる．

$$(\hat{l}_+)^k=(\hbar)^k\cdot(-1)^k\cdot e^{ik\phi}\cdot\sin^{k+\mu}\theta\cdot\frac{\partial^k}{\partial(\cos\theta)^k}(\sin^{-\mu}\theta)\qquad(2\text{-}8\text{-}10)$$

$$(\hat{l}_-)^k = (\hbar)^k \cdot e^{-ik\phi} \cdot \sin^{k-\mu}\theta \cdot \frac{\partial^k}{\partial(\cos\theta)^k}(\sin^\mu\theta) \qquad \text{(2-8-11)}$$

$(\hat{l}_\pm)^k$ の場合も，$(\sin^{\mp\mu}\theta)$を掛けてから微分すること，$Y_{l,\mu} = e^{i\mu\phi}\cdot f_{l,\mu}(\cos\theta)$ の μ に依存していること，に注意が必要．また，$(\hat{l}_+)^k$ には，$(-1)^k$ の因子が現れることにも注意.

「軌道角運動量の量子数 l は 0 叉は正の整数で，半整数値ではない」

§2-4 で見たように角運動量の量子数 J は，一般的には，０叉は正の整数叉は半整数である．しかし，軌道角運動量の量子数 l は半整数値を取らず，l は０叉は正の整数であり，従って，$-l \le m \le l$ の m は必ず 0 を含むこと，を確認しておく.

(2-7-6)と(2-7-7)から，m が最大と最小の $Y_{l,l}$, $Y_{l,-l}$ は,

$$Y_{l,l} = C_l \cdot e^{il\phi} \cdot (\sin\theta)^l \qquad \text{(2-7-6)}$$

$$Y_{l,-l} = C_{-l} \cdot e^{-il\phi} \cdot (\sin\theta)^l \qquad \text{(2-7-7)}$$

である．$Y_{l,l}$ に下降演算子を２l 回作用させると，その結果は定数係数を除き，$Y_{l,-l}$ に一致する.

$$(\hat{l}_-)^{2l} Y_{l,l} = (\text{Constant}) \cdot Y_{l,-l}$$

である．しかし，n≧１として，下降演算子を（２l＋n）回作用させると，その結果は０である．m≦−(l+1)の固有関数は存在しないからである．即ち

$$(\hat{l}_-)^{2l+n} Y_{l,l} = 0 \qquad \text{(2-8-12)}$$

である．この左辺は，(2-8-11)の結果を使うと,

$$(\hat{l}_-)^{2l+n} Y_{l,l} = C_l \cdot (\hbar)^{2l+n} \cdot e^{-i(2l+n)\phi} \cdot \sin^{l+n}\theta \cdot \frac{\partial^{2l+n}}{\partial(\cos\theta)^{2l+n}}(\sin^l\theta \cdot e^{il\phi} \cdot \sin^l\theta)$$

$$= C_l \cdot \hbar^{2l+n} e^{-i(l+n)\phi} \cdot \sin^{(l+n)}\theta \frac{d^{2l+n}}{d(\cos\theta)^{2l+n}}(\sin^{2l}\theta) = 0 \qquad \text{(2-8-13)}$$

この結果は，$\cos\theta = z$とすると,

$$\frac{d^{2l+n}}{dz^{2l+n}}(1-z^2)^l = 0 \qquad (n \ge 1) \qquad \text{(2-8-14)}$$

であることを意味している.

ここでｎ＝１の場合を考えると，$\frac{d}{dz}\{\frac{d^{2l}}{dz^{2l}}(1-z^2)^l\} = 0$ であるから,

$\frac{d^{2l}}{dz^{2l}}(1-z^2)^l = const.$ であり，順次積分すれば,

$$(1-z^2)^l \ = \text{（}2l\text{）次の多項式}, \qquad (2\text{-}8\text{-}15)$$

であることが判る．（$2l$）は下降演算子を繰り返し作用させた回数であるから，一般には，（$2l$）＝0 又は正の整数である．しかし，(2-8-15)から，l は半整数値であることは許されない．例えば，l=1/2 の場合を考えれば，明らかに(2-8-15)は成立しない．軌道角運動量の量子数 l は 0 または正の整数であり，従って，m も整数で必ず 0 を含む．m は磁気量子数と呼ばれる．

$$\begin{aligned} &l = 0,\ 1,\ 2,\ 3,\ \cdots \\ &m = -l,\ -(l-1),\ \cdots,\ -1,\ 0,\ 1,\ \cdots,\ (l-1),\ l \end{aligned} \qquad (2\text{-}8\text{-}16)$$

軌道角運動量の量子数 l の上限は，動径方程式から得られる主量子数（n）で与えられることは§5-1 で確認する．