

角運動量

1. 古典的回転運動と角運動量

量子力学的角運動量を紹介する前に、古典的な角運動量を導入しよう。例えば、図1に示したように、ひもの先に質量 m のおもり（粒子）を付けて回転させることを考えてみよう。ここでは、理想的な場合を考え、ひもの長さは一定で、ひもの太さや質量、さらに粒子にかかる重力は無視する。回転の中心を O とし、粒子の位置を表すベクトルを \mathbf{r} とする。今、ひもの長さは一定なので \mathbf{r} の大きさ ($|\mathbf{r}| = r$) は一定であるが、回転しているので、 \mathbf{r} の向きは平面内で時々刻々変化する。粒子の速度ベクトル \mathbf{v} は大きさが一定で、その向きはやはり平面内で変化するが、常に粒子の位置ベクトル \mathbf{r} に対して垂直である。速度ベクトルの向きが変化するところが等速直線運動と異なる点である。

図2のように、時刻 $t=0$ から $t=\Delta t$ まで変化したとき、粒子が移動した距離 L は、図に示した角度 θ を用いると、弧度法により

$$L = |\mathbf{r}|\theta = r\theta \quad (1)$$

と表される。ここで位置ベクトル \mathbf{r} の大きさを r と表している。速さは距離の時間あたりの変化なので

$$v = \frac{L}{\Delta t} = r \frac{\theta}{\Delta t} \quad (2)$$

となる。微小変化を考えると

$$v = \frac{dL}{dt} = r \frac{d\theta}{dt} = r\omega \quad (3)$$

となる。ここで導入した $\omega = \frac{d\theta}{dt}$ は角速度とよばれ、角度の時間変化を表すものである。一定速度の回転とはこの角速度 ω の大きさが一定の回転を指す。

粒子の運動エネルギーは

$$E = \frac{1}{2}mv^2 \quad (4)$$

で与えられる。これは回転の場合も同じであり、(3)式の関係代入すると次式のように表すことができる。

$$E = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{1}{2}m(r\omega)^2 = \frac{1}{2}mr^2\omega^2 \quad (5)$$

ここで、慣性モーメント I を

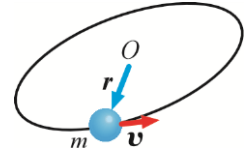


図1. 回転運動

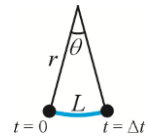


図2. 角度と弧の長さ

$$I = mr^2 \quad (6)$$

と定義すると、運動エネルギーは

$$E = \frac{1}{2} I \omega^2 \quad (7)$$

となる。回転運動の場合は速度よりも角速度を用いた方がわかりやすいので、一般に回転の運動エネルギーは(7)式で表される。この式は、回転運動における質量に対応するものが慣性モーメントであり、速度に対応するものが角速度であることを示している。さらに、運動量 $p = mv$ に対応するものとして、角速度と慣性モーメントを用いて、角運動量 P_r を定義される。角運動量の大きさは

$$P_r = I\omega \quad (8)$$

であり、この関係を用いると回転エネルギーは

$$E = \frac{P_r^2}{2I} \quad (9)$$

と表され、通常の運動エネルギーの表式

$$E = \frac{p^2}{2m} \quad (10)$$

と同じ形式になる。運動量保存則と同様に、角運動量保存則もあり、角運動量は重要な物理量である。

この角運動量の大きさは

$$P_r = I\omega = mr^2 \frac{d\theta}{dt} = mrv = |\mathbf{r}| |\mathbf{p}| \quad (11)$$

と表すことができ、角運動量の大きさは位置ベクトルと運動量ベクトルの大きさの積になる。位置ベクトルと運動量ベクトルを用いた角運動量の定義は

$$\mathbf{P}_r = \mathbf{r} \times \mathbf{p} \quad (12)$$

である。ここで、 \times の記号はベクトルの外積*1を表す。ベクトルの外積はベクトルを与えるので、角運動量もやはりベクトル量である。図3に示したように、角運動量は \mathbf{r} と \mathbf{p} の両方に垂直な方向を向くベクトルになる。

ここまで、平面内の粒子の回転を用いて角運動量を説明してきたが、平面内だけでなく同様に扱うことができる。興味があれば、一般的な物理の力学の教科書を参考にして欲しい。

*1 ベクトルの外積

2つのベクトル

$$\mathbf{a} = (x_a, y_a, z_a)$$

$$\mathbf{b} = (x_b, y_b, z_b)$$

の外積を $\mathbf{c} = (x_c, y_c, z_c)$ とすると、その成分は以下の式で与えられる。

$$x_c = y_a z_b - z_a y_b$$

$$y_c = z_a x_b - x_a z_b$$

$$z_c = x_a y_b - y_a x_b$$

さらに、 \mathbf{a} と \mathbf{b} のなす角を θ とすると、

$$|\mathbf{c}| = |\mathbf{a}| |\mathbf{b}| \sin \theta$$

の関係がある。

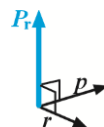


図3. ベクトルの外積としての角運動量

2. 量子力学的角運動量

回転運動を量子力学的に扱うためには、古典的位置および運動量を量子力学の演算子に置き換えればよい。量子力学的角運動量（一般に $\hat{\mathbf{J}}$ と表される。）は (12) 式の中の位置ベクトル、運動量ベクトルをそれぞれ演算子に置き換えることで得られる。

$$\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{x}} \times \hat{\mathbf{p}} \quad (13)$$

量子力学的角運動量の成分を書き下すと

$$\begin{aligned} J_x &= yp_z - zp_y = -i\hbar \left\{ y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right\} \\ J_y &= zp_x - xp_z = -i\hbar \left\{ z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right\} \\ J_z &= zp_y - yp_x = -i\hbar \left\{ x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right\} \end{aligned} \quad (14)$$

となり、角運動量と成分の間には以下の関係がある。

$$\hat{\mathbf{J}}^2 = J_x^2 + J_y^2 + J_z^2 \quad (15)$$

角運動量の状態は $\hat{\mathbf{J}}^2$ と J_z の 2 つの演算子の固有関数となっており、2 つの量子数 J と m_J で指定される。角運動量状態の波動関数を $\psi(J, m_J)$ とすると、

$$\hat{\mathbf{J}}^2 \psi(J, m_J) = J(J+1)\hbar^2 \psi(J, m_J), \quad J_z \psi(J, m_J) = m_J \hbar \psi(J, m_J) \quad (16)$$

の関係がある。つまり、 $\hat{\mathbf{J}}^2$ の固有値は $J(J+1)\hbar^2$ であり、 J_z の固有値は $m_J \hbar$ である。これらの固有値を見ると、量子力学的角運動量は \hbar が単位となっていることがわかる。角運動量量子数は 0 以上の整数または半整数であり、 m_J の取り得る値には

$$m_J = -J, -J+1, \dots, J-1, J \quad (17)$$

の制限がある。

水素原子の中の電子軌道を指定する際に、主量子数 n 、方位量子数 ℓ 、磁気量子数 m_ℓ の 3 つの量子数を用いたが、方位量子数が J に、磁気量子数が m_J に該当する。（主量子数は角運動量量子数ではない。）

角運動量の 3 つの演算子のうち、 J_z にのみ、固有関数、量子数を示したが、 J_x 、 J_y についてふれていないことに疑問を持った人がいるかもしれない。それは、不確定性原理に由来する量子力学的角運動量の性質によるためである。量子化学の導入の際に位置演算子と運動量演算子の間の不確定性原理を紹介した。

(13)式で示したように、角運動量は位置演算子と運動量演算子から導かれるものなので、量子力学的角運動量にも不確定性原理に由来する性質がある。それは、角運動量演算子の3つの成分のうち、1つだけが固有値を持つことができ、その他の2つは決まった値を取らないという性質である。

$$\langle J_x \rangle = \langle J_y \rangle = 0, \quad \langle J_z \rangle = m\hbar \quad (18)$$

量子力学の慣習から固有値を持つ成分をz成分とし、残りの2つをx, y成分にとる。そのため、3つの成分のうち、 J_z 成分のみが特別扱いであったわけである。上の式で、注意してほしいことは、 J_x および J_y の期待値が0であって、常に $J_x = J_y = 0$ ではないということである。($J_x = J_y = 0$ ということは、 J_x および J_y が0という決まった値を取っているということになる。)

この性質を表すモデルとしてベクトルモデルがある。図4に示したように、角運動量ベクトルがz軸のまわりで歳差運動しているものである。図では、角運動量ベクトル \mathbf{J} が原点から点 $P(x, y, z)$ を結ぶベクトルとして表されている。このモデルでは \mathbf{J} の大きさと J_z の値つまりzの値は一定である。

$$|\mathbf{J}| = \sqrt{J_x^2 + J_y^2 + J_z^2}, \quad J_z = m_J \quad (19)$$

つまり、ベクトル \mathbf{J} の終点 P は常に $z = m_J$ の平面内にある。さらに、点 P は円周($x^2 + y^2 = \text{一定}$)の上を一定速度で運動しているとする。この条件では、(18)式の角運動量の3つの成分に対する条件が満足されており、結果として \mathbf{J} はz軸まわりに歳差運動をすることになる。(これは、あくまでモデルであり、実際には角運動量が一定速度で回転しているわけではない。) 図4に示したように、角運動量 \mathbf{J} とz軸のなす角を θ とすると、 $\cos \theta$ の期待値は

$$\langle \cos \theta \rangle = \frac{m_J}{\sqrt{J(J+1)}} \quad (20)$$

与えられる。この関係は、 m_J が空間内における角運動量の向きを表していることを示している。

このように、角運動量はベクトルであるが、歳差運動している点が直線運動量とは異なる点である。ここでは、角運動量の導入のみを紹介している。角運動量に対するより詳細な性質や解説は、量子化学、量子力学の教科書を参考にされたい。

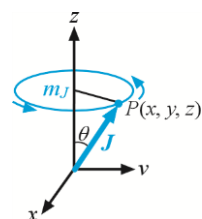


図4. 角運動量のベクトルモデル