軌道角運動量演算子 $\hat{\ell}_z, \hat{\boldsymbol{\ell}}^2$ の同時固有状態を $|\ell, m\rangle$ として, 次の公式が与えられている。

$$\left\langle \ell m' | \hat{\ell}_z | \ell m \right\rangle = m\hbar\ \delta_{m'm}, \tag{1}$$

$$\left\langle \ell m' | \hat{\ell}^2 | \ell m \right\rangle = \ell(\ell+1)\hbar^2\ \delta_{m'm}, \tag{2}$$

$$\left\langle \ell m' | \hat{\ell}_\pm | \ell m \right\rangle = \sqrt{\ell(\ell+1) - m(m\pm 1)}\ \hbar\ \delta_{m'm\pm 1}, \tag{3}$$

$$-\ell \le m, m' \le \ell. \tag{4}$$

ここで、$\hat{\ell}_\pm \equiv \hat{\ell}_x \pm \mathrm{i}\hat{\ell}_y$ である。$\ell = 1$ の場合を考え、$m = +1, 0, -1$ をもつ量子状態の列ベクトルをそれぞれ 1、2、3 番目の列ベクトルとする：

$$|1\rangle \equiv |\ell, m=+1\rangle \equiv \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, |2\rangle \equiv |\ell, m=0\rangle \equiv \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, |3\rangle \equiv |\ell, m=-1\rangle \equiv \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

1. 次の問いに答えよ。
   (a) 軌道角運動量演算子 $\hat{\ell}_z$ の行列表現（または表現行列）を求めよ。
   (b) 軌道角運動量演算子 $\hat{\boldsymbol{\ell}}^2$ の行列表現を求めよ。
   (c) 軌道角運動量演算子 $\hat{\ell}_+$ の行列表現を求めよ。
   (d) 軌道角運動量演算子 $\hat{\ell}_-$ の行列表現を求めよ。
   (e) 軌道角運動量演算子 $\hat{\ell}_x$ の行列表現を求めよ。
   (f) 軌道角運動量演算子 $\hat{\ell}_y$ の行列表現を求めよ。
2. 以上の結果を用いて、交換関係 $[\hat{\ell}_x, \hat{\ell}_y] = i\hbar\hat{\ell}_z$ を確かめよ。

(解答例)

1. (a) 題意より、それぞれの場合に与えられた公式と、$\hat{\ell}_z, \hat{\boldsymbol{\ell}}^2$ がエルミート演算子であることを用いて

$$\begin{aligned}(\hat{\ell}_z)_{11} &\equiv \langle 1|\hat{\ell}_z|1\rangle \\ &\equiv \langle \ell=1, m=1|\hat{\ell}_z|\ell=1, m=1\rangle \\ &= \hbar,\end{aligned} \tag{5}$$

$$\begin{aligned}(\hat{\ell}_z)_{12} &\equiv \langle 1|\hat{\ell}_z|2\rangle \\ &\equiv \langle 1,1|\hat{\ell}_z|1,0\rangle \\ &= 0,\end{aligned} \tag{6}$$

$$\begin{aligned}(\hat{\ell}_z)_{13} &\equiv \langle 1|\hat{\ell}_z|3\rangle \\ &\equiv \langle 1,1|\hat{\ell}_z|1,-1\rangle\end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
&= 0, && (7)\\
(\hat{\ell}_z)_{21} &= (\hat{\ell}_z)_{12} \\
&= 0, && (8)\\
(\hat{\ell}_z)_{22} &\equiv \langle 2|\hat{\ell}_z|2\rangle \\
&\equiv \langle 1,0|\hat{\ell}_z|,0\rangle \\
&= 0, && (9)\\
(\hat{\ell}_z)_{31} &= (\hat{\ell}_z)_{13} \\
&= 0, && (10)\\
(\hat{\ell}_z)_{32} &= (\hat{\ell}_z)_{23} \\
&= 0, && (11)\\
(\hat{\ell}_z)_{33} &\equiv \langle 3|\hat{\ell}_z|3\rangle \\
&\equiv \langle \ell=1,m=-1|\hat{\ell}_z|\ell=1,m=-1\rangle \\
&= -\hbar. && (12)
\end{aligned}
$$

以上の結果をまとめると

$$
\hat{\ell}_z = \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{13}
$$

(b) 同様に

$$
\begin{aligned}
(\hat{\boldsymbol{\ell}}^2)_{11} &= 2\hbar^2 \\
&= (\hat{\boldsymbol{\ell}}^2)_{22} \\
&= (\hat{\boldsymbol{\ell}}^2)_{33}, && (14)\\
(\hat{\boldsymbol{\ell}}^2)_{12} &= 0 \\
&= (\hat{\boldsymbol{\ell}}^2)_{21} \\
&= (\hat{\boldsymbol{\ell}}^2)_{13} \\
&= (\hat{\boldsymbol{\ell}}^2)_{31} \\
&= (\hat{\boldsymbol{\ell}}^2)_{13} \\
&= (\hat{\boldsymbol{\ell}}^2)_{31}. && (15)
\end{aligned}
$$

以上の結果をまとめると

$$
\hat{\boldsymbol{\ell}}^2 = 2\hbar^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{16}
$$

(c) 同様に

$$
(\hat{\ell}_+)_{11} \equiv \langle 1|\hat{\ell}_+|1\rangle
$$

$$
\begin{aligned}
&\equiv \langle \ell = 1, m' = 1|\hat{\ell}_+|\ell = 1, m = 1\rangle \\
&= 0, \qquad (17) \\
(\hat{\ell}_+)_{12} &\equiv \langle 1|\hat{\ell}_+|2\rangle \\
&\equiv \langle 1, 1|\hat{\ell}_+|1, 0\rangle \\
&= \hbar\sqrt{1(1+1) - (-0)(-0+1)} \\
&= \hbar\sqrt{2}, \qquad (18) \\
(\hat{\ell}_+)_{13} &\equiv \langle 1, 1|\hat{\ell}_+|1, -1\rangle \\
&= 0, \qquad (19) \\
(\hat{\ell}_+)_{21} &\equiv \langle 1, 0|\hat{\ell}_+|1, 1\rangle \\
&= 0, \qquad (20) \\
(\hat{\ell}_+)_{22} &\equiv \langle 1, 0|\hat{\ell}_+|1, 0\rangle \\
&= 0, \qquad (21) \\
(\hat{\ell}_+)_{23} &\equiv \langle 1, 0|\hat{\ell}_+|1, -1\rangle \\
&= \hbar\sqrt{1(1+1) - (-1)(-1+1)} \\
&= \hbar\sqrt{2}, \qquad (22) \\
(\hat{\ell}_+)_{31} &\equiv \langle 1, -1|\hat{\ell}_+|1, 1\rangle \\
&= 0, \\
(\hat{\ell}_+)_{32} &\equiv \langle 1, -1|\hat{\ell}_+|1, 0\rangle \\
&= 0, \\
(\hat{\ell}_+)_{33} &\equiv \langle 1, -1|\hat{\ell}_+|1, -1\rangle \\
&= 0. \qquad (23)
\end{aligned}
$$

故に

$$
\hat{\ell}_+ = \sqrt{2}\hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \qquad (24)
$$

(d) 同様に

$$
\begin{aligned}
(\hat{\ell}_-)_{11} &\equiv \langle 1|\hat{\ell}_-|1\rangle \equiv \langle 1, 1|\hat{\ell}_-|1, 1\rangle = 0, \qquad (25) \\
(\hat{\ell}_-)_{12} &\equiv (\hat{\ell}_-)_{13} = 0, \qquad (26) \\
(\hat{\ell}_-)_{21} &\equiv \langle 2|\hat{\ell}_-|1\rangle \equiv \langle 1, 0|\hat{\ell}_-|1, 1\rangle = \hbar\sqrt{1(1+1) - 1\cdot(1-1)} \\
&= \hbar\sqrt{2}, \qquad (27) \\
(\hat{\ell}_-)_{22} &\equiv (\hat{\ell}_-)_{23} = (\hat{\ell}_-)_{31} = (\hat{\ell}_-)_{33} = 0, \qquad (28) \\
(\hat{\ell}_-)_{32} &\equiv \langle 1, -1|\hat{\ell}_-|1, 0\rangle \\
&= \hbar\sqrt{1(1+1) - 0\cdot(0-1)}
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
&= \hbar\sqrt{2}, \\
(\hat{\ell}_-)_{33} &\equiv \langle 1,-1|\hat{\ell}_-|1,-1\rangle \\
&= 0. \qquad (29)
\end{aligned}
$$

故に

$$
\hat{\ell}_- = \sqrt{2}\hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \qquad (30)
$$

(e) 以上の結果と $\hat{\ell}_\pm$ の定義を用いて

$$
\hat{\ell}_x = \frac{\hat{\ell}_+ + \hat{\ell}_-}{2} = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \qquad (31)
$$

が得られる。

(f) 同様に

$$
\hat{\ell}_y = \frac{\hat{\ell}_+ - \hat{\ell}_-}{2\mathrm{i}} = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -\mathrm{i} & 0 \\ \mathrm{i} & 0 & -\mathrm{i} \\ 0 & \mathrm{i} & 0 \end{pmatrix}. \qquad (32)
$$

2. 以上の結果を用いて、

$$
\begin{aligned}
[\hat{\ell}_x, \hat{\ell}_y] &= \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -\mathrm{i} & 0 \\ \mathrm{i} & 0 & -\mathrm{i} \\ 0 & \mathrm{i} & 0 \end{pmatrix} - \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -\mathrm{i} & 0 \\ \mathrm{i} & 0 & -\mathrm{i} \\ 0 & \mathrm{i} & 0 \end{pmatrix} \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \\
&= \frac{\mathrm{i}\hbar^2}{2} \left[ \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & -1 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \end{pmatrix} \right] \\
&= \mathrm{i}\hbar\hat{\ell}_z. \qquad (33)
\end{aligned}
$$