角運動量の 2 乗演算子 $\hat{\boldsymbol{\ell}}^2$ と角運動量演算子の z 成分 $\hat{\ell}_z$ の同時固有関数は球面調和関数 $Y_{\ell m}(\theta,\phi)$ であり、ここで次のような行列要素を考える。

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

$$\begin{aligned}\langle \ell m|\hat{\ell}_x|\ell m'\rangle &= \langle \ell m|\frac{\hat{\ell}_+ + \hat{\ell}_-}{2}|\ell m'\rangle \\ &= \frac{\hbar}{2}[\sqrt{(\ell+m)(\ell-m+1)}\delta_{m,m'+1} + \sqrt{(\ell-m)(\ell+m+1)}\delta_{m,m'-1}],\end{aligned} \tag{2}$$

$$\begin{aligned}\langle \ell m|\hat{\ell}_y|\ell m'\rangle &= \langle \ell m|\frac{\hat{\ell}_+ + \hat{\ell}_-}{2i}|\ell m'\rangle \\ &= \frac{\hbar}{2i}[\sqrt{(\ell+m)(\ell-m+1)}\delta_{m,m'+1} - \sqrt{(\ell-m)(\ell+m+1)}\delta_{m,m'-1}]\end{aligned} \tag{3}$$

具体的に、$\ell = 1/2$ の場合を考える。この場合、$m, m' = -1/2, 1/2$ であるから、角運動量演算子の行列は (2×2) 行列になる。これらの演算子の x, y, z 成分を特に、$\hat{s}_x, \hat{s}_y, \hat{s}_z$ と記して、行列要素を求めよ。また、$[\hat{s}_x, \hat{s}_y] = i\hbar\hat{s}_z$ であることを確かめよ。

(解答例) $\hat{s}_z$ の行列は対角型であり、上に与えた関係式より, 自明である。まず、対角型の行列を示す。

$$(\langle \ell m|\hat{s}_z|\ell m'\rangle) = \begin{array}{c c} & \begin{array}{cc} m'=+1/2 & m'=-1/2 \end{array} \\ \begin{array}{c} m=+1/2 \\ m=-1/2 \end{array} & \begin{pmatrix} \hbar/2 & 0 \\ 0 & -\hbar/2 \end{pmatrix} \end{array}, \tag{4}$$

次に非対角型の行列を示す。

$$(\langle \ell m|\hat{s}_x|\ell m'\rangle) = \begin{array}{c c} & \begin{array}{cc} m'=+1/2 & m'=-1/2 \end{array} \\ \begin{array}{c} m=+1/2 \\ m=-1/2 \end{array} & \begin{pmatrix} 0 & \hbar/2 \\ \hbar/2 & 0 \end{pmatrix} \end{array}, \tag{5}$$

$$(\langle \ell m|\hat{s}_y|\ell m'\rangle) = \begin{array}{c c} & \begin{array}{cc} m'=+1/2 & m'=-1/2 \end{array} \\ \begin{array}{c} m=+1/2 \\ m=-1/2 \end{array} & \begin{pmatrix} 0 & -i\hbar/2 \\ i\hbar/2 & 0 \end{pmatrix} \end{array}, \tag{6}$$

以上実例として説明したように、角運動量演算子の行列はエルミート性をもつことがわかる。

さらに

$$\begin{aligned}[\hat{s}_x, \hat{s}_y] &= \frac{\hbar^2}{4}\{\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\} \\ &= \frac{\hbar^2 i}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \\ &= i\hbar\hat{s}_z.\end{aligned} \tag{7}$$