3次元系における量子力学

位置演算子、運動量演算子と交換関係

ハミルトニアン、シュレディンガー方程式と波動関数

軌道角運動量演算子の定義

軌道角運動量演算子の正準交換関係

軌道角運動量演算子の固有値と固有関数(固有状態)

軌道角運動量演算子の行列表現

軌道角運動量の量子的揺らぎ

中心力の場合

Made by R. Okamoto (Kyushu Institute of Technology)
filename=3dim-Quantum-Summary110622.ppt

3次元系の位置演算子、運動量演算子と交換関係

$$\hat{x} = x,\ \hat{p}_x = \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial x} \to \left[\hat{x},\ \hat{p}_x\right] = \mathrm{i}\hbar,$$

$$\hat{y} = y,\ \hat{p}_y = \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial y} \to \left[\hat{y},\ \hat{p}_y\right] = \mathrm{i}\hbar,$$

$$\hat{z} = z,\ \ \hat{p}_z = \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial z} \to \left[\hat{z},\ \hat{p}_z\right] = \mathrm{i}\hbar$$

$$\left[\hat{x},\ \hat{y}\right] = \left[\hat{x},\ \hat{z}\right] = \left[\hat{x},\ \hat{p}_y\right] = \left[\hat{x},\ \hat{p}_z\right] = 0,$$

$$\left[\hat{y},\ \hat{z}\right] = \left[\hat{y},\ \hat{p}_x\right] = \left[\hat{y},\ \hat{p}_z\right] = 0,$$

$$\left[\hat{z},\ \hat{p}_x\right] = \left[\hat{z},\ \hat{p}_y\right] = 0,\quad \left[\hat{p}_x,\ \hat{p}_y\right] = \left[\hat{p}_x,\ \hat{p}_z\right] = \left[\hat{p}_y,\ \hat{p}_z\right] = 0,$$

3次元系のハミルトニアン、シュレディンガー方程式と波動関数

ハミルトニアン
$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U(x,y,z;t)$$

$$\Delta \equiv \nabla^2 \equiv \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

シュレディンガー方程式（時間依存の場合）

$$\hat{H}\Psi(x,y,z;t) = \mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,y,z;t)$$

シュレディンガー方程式（時間依存しない場合）

$$\text{when} \quad U = U(x,y,z)$$

$$\hat{H}\psi(x,y,z) = E\psi(x,y,z)$$

$$\Psi(x,y,z;t) = \psi(x,y,z)\exp(-\mathrm{i}Et/\hbar)$$

規格化
$$\int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty}\Psi^*(x,y,z,t)\Psi(x,y,z,t)dxdydz = 1$$

軌道角運動量演算子の定義

量子力学：波動関数の方向依存性の度合いとしての角運動量

$$\hat{\ell}_x \equiv \hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y = \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y} \right),$$

$$\hat{\ell}_y \equiv \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z = \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z} \right),$$

$$\hat{\ell}_z \equiv \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x = \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x} \right)$$

古典物理学：「回転する勢い」として角運動量

$$\vec{\ell} \equiv \vec{r} \times \vec{p} = (yp_z - zp_y, zp_x - xp_z, xp_y - yp_x)$$

$$\vec{p} \equiv m\vec{v}$$

$$\vec{\hat{\ell}} \equiv (\hat{\ell}_x, \hat{\ell}_y, \hat{\ell}_z), \quad \vec{\hat{\ell}}^2 \equiv \hat{\ell}_x^{\ 2} + \hat{\ell}_y^{\ 2} + \hat{\ell}_z^{\ 2},$$

角運動量の2乗演算子

$$\hat{\ell}_\pm \equiv \hat{\ell}_x \pm \mathrm{i}\hat{\ell}_y$$

昇降演算子

$$\rightarrow \hat{\ell}_x = \frac{1}{2}\left(\hat{\ell}_+ + \hat{\ell}_-\right), \quad \hat{\ell}_y = \frac{1}{2\mathrm{i}}\left(\hat{\ell}_+ - \hat{\ell}_-\right)$$

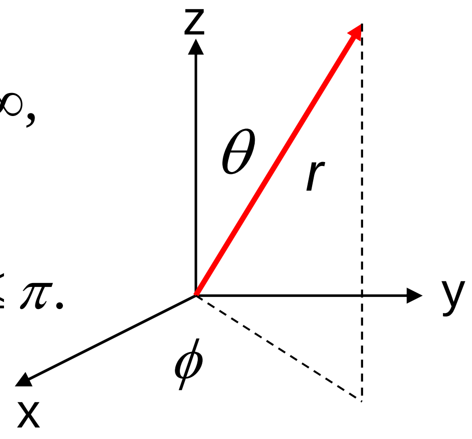
$$\rightarrow \vec{\hat{\ell}}^2 = \hat{\ell}_+\hat{\ell}_- + \hat{\ell}_z^{\ 2} - \hbar\hat{\ell}_z = \hat{\ell}_-\hat{\ell}_+ + \hat{\ell}_z^{\ 2} + \hbar\hat{\ell}_z$$

$$= \frac{1}{2}\left(\hat{\ell}_+\hat{\ell}_- + \hat{\ell}_-\hat{\ell}_+\right) + \hat{\ell}_z^{\ 2}$$

軌道角運動量演算子の極座標表現

直交直線座標と極座標の関係

$$\begin{cases} x = r\sin\theta\cos\phi \\ y = r\sin\theta\sin\phi, \\ z = r\cos\theta. \end{cases} \quad \begin{cases} r = \sqrt{x^2+y^2+z^2}, 0 \le r < \infty, \\ \tan\phi = y/x, 0 \le \phi \le 2\pi \\ \tan\theta = \sqrt{x^2+y^2}/z, 0 \le \theta \le \pi. \end{cases}$$



軌道角運動量演算子の極座標表現

$$\hat{\ell}_{\pm} = \hbar\, \mathrm{e}^{\pm \mathrm{i}\phi}\left(\pm\frac{\partial}{\partial\theta} + \mathrm{i}\frac{1}{\tan\theta}\frac{\partial}{\partial\phi} \right) \text{(複合同順)}$$

$$\hat{\ell}_{\mathrm{z}} = \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial\phi}$$

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

波動関数の角度変化率(方向依存性)としての(軌道)角運動量

軌道角運動量演算子の正準交換関係

$$\left[\hat{\ell}_x,\hat{\ell}_y\right]=i\hbar\hat{\ell}_z,\ \left[\hat{\ell}_y,\hat{\ell}_z\right]=i\hbar\hat{\ell}_x,\ \left[\hat{\ell}_z,\hat{\ell}_x\right]=i\hbar\hat{\ell}_y,$$

$$\left[\hat{\vec{\ell}}^2,\hat{\ell}_x\right]=\left[\hat{\vec{\ell}}^2,\hat{\ell}_y\right]=\left[\hat{\vec{\ell}}^2,\hat{\ell}_z\right]=0,$$

$$\rightarrow\left[\hat{\ell}_z,\hat{\ell}_\pm\right]=\pm\hbar\hat{\ell}_\pm,\left[\hat{\ell}_+,\hat{\ell}_-\right]=2\hbar\hat{\ell}_z$$

軌道角運動量のx、y、z成分はお互いに同時固有状態を持たないこと

軌道角運動量の二乗とx、y、z成分のどれかひとつは
お互いに同時固有状態を持つこと

$\longrightarrow$ 通常は軌道角運動量の二乗とz成分の同時固有状態を考える
(量子化軸としてz軸に選ぶこと)

軌道角運動量演算子の固有値と固有関数(固有状態)

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

$$\hat{\ell}_z \left| \ell\, m \right\rangle = \hbar\, m \left| \ell\, m \right\rangle,$$

$$\hat{\ell}_\pm \left| \ell\, m \right\rangle = \hbar \sqrt{\ell(\ell+1) - m(m\pm1)} \left| \ell\, m\pm1 \right\rangle,$$

$$\left\langle \ell' m' | \ell m \right\rangle = \delta_{\ell\ell'} \cdot \delta_{mm'}$$

$$\ell = 0, 1, 2, \cdots$$

軌道角運動量の量子化

$$m = -\ell, -\ell+1, \cdots, \ell-1, \ell \quad (\ell \text{の各値につき})$$

方向量子化

$$\left| \ell m \right\rangle \Leftrightarrow Y_{\ell m}(\theta, \phi) : \text{球面調和関数}$$

$$\left\langle \ell' m' | \ell m \right\rangle \Leftrightarrow \int_{\theta=0}^{\theta=\pi} \int_{\phi=0}^{\phi=2\pi} Y^*_{\ell' m'}(\theta, \phi) Y_{\ell m}(\theta, \phi) \sin\theta\, d\theta\, d\phi$$

球面調和関数の直交規格性と具体例

$$\int_{\theta=0}^{\theta=\pi}\int_{\phi=0}^{\phi=2\pi} Y_{\ell' m'}^{*}(\theta,\phi) Y_{\ell m}(\theta,\phi)\sin\theta d\theta d\phi = \delta_{\ell\ell'}\delta_{mm'}$$

$$Y_{00}(\theta,\phi) = \tfrac{1}{\sqrt{4\pi}},$$

$$Y_{10}(\theta,\phi) = \tfrac{1}{2}\sqrt{\tfrac{3}{\pi}}\cos\theta,$$

$$Y_{1,\pm1}(\theta,\phi) = \mp\tfrac{1}{2}\sqrt{\tfrac{3}{2\pi}}\sin\theta\cdot \mathrm{e}^{\pm \mathrm{i}\phi},$$

$$Y_{20}(\theta,\phi) = \tfrac{1}{4}\sqrt{\tfrac{5}{\pi}}(3\cos^2\theta - 1),$$

$$Y_{2,\pm1}(\theta,\phi) = \mp\tfrac{1}{4}\sqrt{\tfrac{3\cdot5}{2\pi}}\sin 2\theta\cdot \mathrm{e}^{\pm \mathrm{i}\phi},$$

$$Y_{2,\pm2}(\theta,\phi) = \tfrac{1}{4}\sqrt{\tfrac{3\cdot5}{2\pi}}\sin^2\theta\cdot \mathrm{e}^{\pm \mathrm{i}2\phi}$$

軌道角運動量演算子の行列表現

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

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

$$\left\langle \ell' m' \,|\, \hat{\ell}_\pm \,|\, \ell\, m \right\rangle = \hbar \sqrt{\ell(\ell+1) - m(m\pm1)}\, \delta_{\ell\ell'} \delta_{m',m\pm1}$$

$\ell = 1$の場合：$m, m' = 0, \pm1$

$$\hat{\ell}_z = \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad \hat{\ell}^2 = 2\hbar^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

$$\hat{\ell}_+ = \sqrt{2}\hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\ell}_- = \sqrt{2}\hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

軌道角運動量の量子的揺らぎ

$$\left(\Delta\ell_x\right)^2 \equiv \left\langle \ell\, m \,|\, \hat{\ell}_x^2 \,|\, \ell\, m \right\rangle - \left\langle \ell\, m \,|\, \hat{\ell}_x \,|\, \ell\, m \right\rangle^2$$

$$= \hbar^2(\ell^2 + \ell - m^2)/2$$

$$\left(\Delta\ell_y\right)^2 \equiv \left\langle \ell\, m \,|\, \hat{\ell}_y^2 \,|\, \ell\, m \right\rangle - \left\langle \ell\, m \,|\, \hat{\ell}_y \,|\, \ell\, m \right\rangle^2$$

$$= \hbar^2(\ell^2 + \ell - m^2)/2$$

$$\left(\Delta\ell_z\right)^2 \equiv \left\langle \ell\, m \,|\, \hat{\ell}_z^2 \,|\, \ell\, m \right\rangle - \left\langle \ell\, m \,|\, \hat{\ell}_z \,|\, \ell\, m \right\rangle^2$$

$$= 0$$

$\longrightarrow$ for when $\ell=0$: $\left(\Delta\ell_x\right)^2 = \left(\Delta\ell_y\right)^2 = 0$

for when $\ell=1/2$: $\left(\Delta\ell_x\right)^2 = \left(\Delta\ell_y\right)^2 = \frac{1}{2}\hbar^2$

for when $\ell=1,\ m=0,\pm1$: $\left(\Delta\ell_x\right)^2 = \left(\Delta\ell_y\right)^2 = (2-m^2)\hbar^2$

中心力の場合

$$V(x,y,z)=V(r)$$

変数変換

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

$$\hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V(x,y,z),$$

$$\hat{H}\psi(x,y,z)=E\psi(x,y,z)$$

ラプラシアン（ラプラスの演算子）

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

$$=\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)-\frac{\hat{\ell}^2}{r^2\hbar^2}$$

$$\hat{\ell}^2/\hbar^2=-\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}$$

$$\psi(x,y,z)=R(r)Y_{\ell m}(\theta,\phi)$$

$$\hat{\vec{\ell}}^2\,Y_{\ell m}(\theta,\phi)=\ell(\ell+1)\hbar^2\,Y_{\ell m}(\theta,\phi)$$

動径方向のシュレディンガー方程式

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{d^2R(r)}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{dR(r)}{dr}\right]+\left[U(r)+\underset{\substack{\uparrow \\ \text{「遠心力」ポテンシャル}}}{\frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2mr^2}}\right]R(r)=E\ R(r)$$

別の表現

$$R(r)=\frac{\chi(r)}{r},\quad \chi(r)\equiv r\cdot R(r)$$

$$\to\frac{d^2\chi(r)}{dr^2}=\frac{d^2R(r)}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{dR(r)}{dr}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\chi(r)}{dr^2}+\left[U(r)+\frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2mr^2}\right]\chi(r)=E\ \chi(r)$$

もとのシュレディンガー方程式に比べて

１階微分がないので、数学的解法が容易になる！