3 次元系における角運動量と球対称ポテンシャル

filename=angularmomentum060506.tex

1　3 次元系における角運動量演算子とその性質

1.1　角運動量演算子とその交換関係

2 次元の場合と同様に, 角運動量演算子（の直交直線座標表示）は次のように与えられる。

$$\hat{\boldsymbol{\ell}} = \frac{\hbar}{i}\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{\nabla} = \hat{\ell}_x\boldsymbol{i} + \hat{\ell}_y\boldsymbol{j} + \hat{\ell}_z\boldsymbol{k} \tag{1.1}$$

$$\Longleftrightarrow \hat{\ell}_x = \frac{\hbar}{i}(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}),\ \hat{\ell}_y = \frac{\hbar}{i}(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}),\ \hat{\ell}_z = \frac{\hbar}{i}(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}). \tag{1.2}$$

さらに角運動量の 2 乗演算子も次式で定義する。

$$\hat{\boldsymbol{\ell}}^2 \equiv \hat{\ell}_x^2 + \hat{\ell}_y^2 + \hat{\ell}_z^2. \tag{1.3}$$

これらの角運動量演算子の間には次のような交換関係がなりたつ。

$$[\hat{\ell}_x, \hat{\ell}_y] = i\hbar\hat{\ell}_z, [\hat{\ell}_y, \hat{\ell}_z] = i\hbar\hat{\ell}_x, [\hat{\ell}_z, \hat{\ell}_x] = i\hbar\hat{\ell}_y, (\hat{\boldsymbol{\ell}}\times\hat{\boldsymbol{\ell}} = i\hbar\hat{\boldsymbol{\ell}}) \tag{1.4}$$

$$[\hat{\boldsymbol{\ell}}^2, \hat{\ell}_x] = [\hat{\boldsymbol{\ell}}^2, \hat{\ell}_y] = [\hat{\boldsymbol{\ell}}^2, \hat{\ell}_z] = 0, ([\hat{\boldsymbol{\ell}}^2, \hat{\boldsymbol{\ell}}] = 0). \tag{1.5}$$

すなわち、成分同士は相互に交換しないが、角運動量の 2 乗演算子と各成分間は交換可能である。さらに、x, y 成分の線型結合により、非エルミート型の新しい演算子を定義すると、以上の性質より別の交換関係が導かれる。

$$\hat{\ell}_\pm \equiv \hat{\ell}_x \pm i\hat{\ell}_y, \hat{\ell}_- = \hat{\ell}_+^\dagger \ (\text{複合同順}) \tag{1.6}$$

$$\hat{\boldsymbol{\ell}}^2 = \hat{\ell}_z^2 + \frac{1}{2}(\hat{\ell}_+\hat{\ell}_- + \hat{\ell}_-\hat{\ell}_+) \tag{1.7}$$

$$[\hat{\ell}_z, \hat{\ell}_\pm] = \pm\hbar\hat{\ell}_z. \ (\text{複合同順}) \tag{1.8}$$

これらの関係式は角運動量の種々の性質を計算する場合に使われる。その他にも以下のような交換関係が成立する。

$$[\hat{\ell}_x, \hat{y}] = i\hbar\hat{z},\ [\hat{\ell}_y, \hat{z}] = i\hbar\hat{x},\ [\hat{\ell}_z, \hat{x}] = i\hbar\hat{y}, \tag{1.9}$$

$$[\hat{\ell}_x, \hat{p}_y] = i\hbar\hat{p}_z,\ [\hat{\ell}_y, \hat{p}_z] = i\hbar\hat{p}_x,\ [\hat{\ell}_z, \hat{p}_x] = i\hbar\hat{p}_y. \tag{1.10}$$

1.2　角運動量演算子の極座標表示

極座標を導入する。

$$x = r\sin\theta\cos\phi, y = r\sin\theta\sin\phi, z = r\cos\theta \tag{1.11}$$

$$(-\infty < x < \infty, -\infty < y < \infty, -\infty < z < \infty), \tag{1.12}$$

$$r = \sqrt{x^2+y^2+z^2}, \tan\phi = \frac{y}{x}, \tan\theta = \frac{\sqrt{x^2+y^2}}{z}, \tag{1.13}$$

$$0 \le r < \infty, 0 \le \theta \le \pi, 0 \le \phi \le 2\pi). \tag{1.14}$$

角運動量演算子の極座標表示 (導出は別紙参照）

$$\hat{\ell}_x = i\hbar\left(\sin\phi\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{\cos\theta\cos\phi}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\right) \tag{1.15}$$

$$\hat{\ell}_y = i\hbar\left(-\cos\phi\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{\cos\theta\sin\phi}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\right) \tag{1.16}$$

$$\hat{\ell}_z = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\phi}, \tag{1.17}$$

$$\hat{\ell}_\pm = \hbar \mathrm{e}^{\pm i\phi}\left(\pm\frac{\partial}{\partial\theta} + i\frac{1}{\tan\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\right)\ (\text{複合同順}) \tag{1.18}$$

$$\hat{\boldsymbol{\ell}}^2 = -\hbar^2\left\{\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin\theta^2}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right\} \tag{1.19}$$

1.3 角運動量演算子の固有関数、固有値

角運動量演算子の固有関数を二つの角度についての変数分離型として求める。

$$\hat{\boldsymbol{\ell}}^2 Y(\theta,\phi) = \lambda Y(\theta,\phi), \tag{1.20}$$

$$Y(\theta,\phi) = \Theta(\theta)\Phi(\phi), \tag{1.21}$$

$$\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\Phi(\phi) = -m^2\Phi(\phi), \tag{1.22}$$

$$\Phi_m(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\exp(im\phi), (m = 0, \pm1, \pm2, \cdots). \tag{1.23}$$

ここで、m は角運動量演算子の z 成分の量子数（正負の整数）であって、粒子の質量ではない。$\Phi_m(\phi)$ の性質を考慮すると

$$-\hbar^2\left\{\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\Theta(\theta)\right)\Phi(\phi) + \frac{\Theta(\theta)}{\sin\theta^2}(-m^2)\Phi(\phi)\right\} = \lambda\Theta(\theta)\Phi(\phi) \tag{1.24}$$

$$\to \frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d}{d\theta}\Theta(\theta)\right) + \left(\lambda - \frac{m^2}{\sin\theta^2}\right)\Theta(\theta) = 0. \tag{1.25}$$

ここで変数変換を行う。

$$\xi = \cos\theta \to d\xi = -\sin\theta d\theta \to \frac{d}{d\theta} = \frac{d\xi}{d\theta}\frac{d}{d\xi} = -\sin\theta\frac{d}{d\xi}. \tag{1.26}$$

固有関数 $\Theta(\theta) \equiv P(\xi)(= P)$ の満たすべき方程式は

$$\frac{d}{d\xi}\left[(1-\xi^2)\frac{d}{d\xi}\right]P + \left(\lambda - \frac{m^2}{1-\xi^2}\right)P = 0 \tag{1.27}$$

$$\to (1-\xi^2)\frac{d^2P}{d\xi^2} - 2\xi\frac{dP}{d\xi} + \left(\lambda - \frac{m^2}{1-\xi^2}\right)P = 0. \tag{1.28}$$

この微分方程式はルジャンドルの微分方程式と呼ばれ、有界性を要請すると $\lambda = \ell(\ell+1), \ell = 0, 1, 2, \cdots$ のときに、ルジャンドルの陪多項式と呼ばれる特殊関数 $P_\ell^{|m|}(\xi)$ を解としてもつことが数学的に知られている。

固有関数の規格化を行って、角運動量の固有関数（$\hat{\boldsymbol{\ell}}^2, \hat{\ell}_z$ の同時固有関数）は次のように表される。

$$Y_{\ell m}(\theta,\phi) \equiv (-1)^{\frac{m+|m|}{2}} \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}\frac{(\ell-|m|)!}{(\ell+|m|)!}} \cdot P_\ell^{|m|}(\cos\theta) \cdot \mathrm{e}^{im\phi}. \tag{1.29}$$

ここで $Y_{\ell m}(\theta,\phi)$ は球面調和関数（spherical harmonics）と呼ばれる特殊関数の一つである。この関数の直交規格性は次式で表される。

$$\int_0^\pi \sin\theta d\theta \int_0^{2\pi} d\phi\, Y^*_{\ell m}(\theta,\phi)\, Y_{\ell' m'}(\theta,\phi) = \delta_{\ell\ell'}\delta_{mm'}. \tag{1.30}$$

球面調和関数の具体例:

$$Y_{00}(\theta,\phi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}, \tag{1.31}$$

$$Y_{1,\pm1}(\theta,\phi) = -\frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{2\pi}}\sin\theta \mathrm{e}^{\pm i\phi},\ (\text{複合同順}) \tag{1.32}$$

$$Y_{1,0}(\theta,\phi) = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{\pi}}\cos\theta, \tag{1.33}$$

$$Y_{2,\pm2}(\theta,\phi) = \frac{1}{4}\sqrt{\frac{3\cdot5}{2\pi}}\sin^2\theta \mathrm{e}^{i2\phi} = \frac{1}{8}\sqrt{\frac{3\cdot5}{2\pi}}(1-\cos2\theta)\mathrm{e}^{\pm i2\phi},\ (\text{複合同順}) \tag{1.34}$$

$$Y_{2,\pm1}(\theta,\phi) = -\frac{1}{2}\sqrt{\frac{3\cdot5}{2\pi}}\cos\theta\sin\theta \mathrm{e}^{i\phi} = -\frac{1}{4}\sqrt{\frac{3\cdot5}{2\pi}}\sin2\theta \mathrm{e}^{\pm i\phi},\ (\text{複合同順}) \tag{1.35}$$

$$Y_{2,0}(\theta,\phi) = \frac{1}{4}\sqrt{\frac{5}{\pi}}(3\cos^2\theta - 1) = \frac{1}{8}\sqrt{\frac{5}{\pi}}(1+3\cos2\theta), \tag{1.36}$$

$$\tag{1.37}$$

特殊な値

$$Y_{\ell m}(0,0) = \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}}\delta_{m0}, \tag{1.38}$$

$$Y_{\ell m}(0,\phi) = \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}}\delta_{m0}. \tag{1.39}$$

ここで、角運動量演算子に重要な固有値をまとめておく。

$$\hat{\boldsymbol{\ell}}^2 Y_{\ell m}(\theta,\phi) = \hbar^2\ell(\ell+1)Y_{\ell m}(\theta,\phi),\ (\ell = 0,1,2,\cdots) \tag{1.40}$$

$$\hat{\ell}_z Y_{\ell m}(\theta,\phi) = \hbar m Y_{\ell m}(\theta,\phi),\ (-\ell \le m \le \ell), \tag{1.41}$$

$$\begin{aligned}\hat{\ell}_\pm Y_{\ell m}(\theta,\phi) &= \hbar\sqrt{\ell(\ell+1) - m(m\pm1)}Y_{\ell m\pm1}(\theta,\phi), (\text{複合同順}) \\ &= \hbar\sqrt{(\ell\mp1))(\ell\pm m+1)}Y_{\ell m\pm1}(\theta,\phi), (\text{複合同順})\end{aligned} \tag{1.42}$$

（注意：角運動量演算子を $\hbar\hat{\boldsymbol{\ell}} = \frac{\hbar}{i}\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{\nabla}$ で定義する教科書もある。）

2　球対称ポテンシャルの下のシュレディンガー方程式とその解

3 次元系における、時間に依存しない場、球対称ポテンシャル $U(r), (r = \sqrt{x^2+y^2+z^2})$ が働く場合のシュレディンガー方程式は次のように表される：

$$[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U(r)]\psi = E\psi, (E : \text{エネルギー}) \tag{2.1}$$

このような場合には、3 次元においてラプラス演算子 ∇^2 は極座標 $(x = r\sin\theta\cos\phi, y = r\sin\theta\sin\phi, z = r\cos\theta)$ で表す方が好都合である。

$$\begin{aligned}\nabla^2 &= \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}) + \frac{1}{r^2\sin\theta^2}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2} &(2.2)\\ &= \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}(r^2\frac{\partial}{\partial r}) + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}) + \frac{1}{r^2\sin\theta^2}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2} &(2.3)\end{aligned}$$

極座標で表されたラプラス演算子 ∇^2 の第二項、第三項は角運動量演算子 (1.19) を用いると次のように書き直せる：

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} - \frac{\hat{\boldsymbol{\ell}}^2}{r^2\hbar^2} = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}(r^2\frac{\partial}{\partial r}) - \frac{\hat{\boldsymbol{\ell}}^2}{r^2\hbar^2}. \tag{2.4}$$

このような場合には、波動関数 ψ を動径部分 $R(r)$ と角度部分 $Y_{\ell m}(\theta,\phi)$ の変数分離型として表現すると計算がかなり簡単になる。ここで、

$$\psi(x,y,z) = R(r)Y_{\ell m}(\theta,\phi). \tag{2.5}$$

この解を式 (2.1) に代入して、

$$\hat{\boldsymbol{\ell}}^2 Y_{\ell m}(\theta,\phi) = \ell(\ell+1)\hbar^2 Y_{\ell m}(\theta,\phi) \tag{2.6}$$

という関係を用いると、動径方向の波動関数 $R(r)$ が満たすべき微分方程式

$$\frac{d^2R}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{dR}{dr} + \frac{2m}{\hbar^2}\left[E - U(r) - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2}\right]R = 0 \tag{2.7}$$

が求まる。ここで解 $R(r)$ はポテンシャル $U(r)$ の関数形が、例えば水素原子における電気力のように動径に反比例する形など具体的に与えられれば、量子数 ℓ の値にも依存して決まる。