６章　水素原子続き

$m \neq 0$ の場合には次に定義するルジャンドル陪関数が用いられる。

$$P_l^{|m|}(x) = (1-x^2)^{|m|/2} \frac{d^{|m|}}{dx^{|m|}} P_l(x) \tag{6.26}$$

$m > l$ の時は $P_l^{|m|}(x) = 0$ となる。ルジャンドル多項式の (3) 式同様次の循環式がある。

$$(2l+1)x\, P_l^{|m|}(x) = (l - |m| + 1) P_{l+1}^{|m|}(x) + (l + |m|) P_{l-1}^{|m|}(x) \tag{6}$$

直交性はルジャンドル多項式で行ったと類似の方法で示せる。（宿題２）

ノルムを求めるために (6.23) 式で $m = 0$ と置いて

$$(1-x^2)\frac{d^2P(x)}{dx^2} - 2x\frac{dP(x)}{dx} + l(l+1)P(x) = 0$$

この式を x で $m-1$ 回微分すると

$$(1-x^2)\frac{d^{m+1}P(x)}{dx^{m+1}} - 2mx\frac{d^mP(x)}{dx^m} + \{l(l+1) - m(m-1)\}\frac{d^{m-1}P(x)}{dx^{m-1}} = 0$$

となり、この結果に $(1-x^2)^{m-1}$ を掛けて

$$(1-x^2)^m\frac{d^{m+1}P_l(x)}{dx^{m+1}} - 2mx(1-x^2)^{m-1}\frac{d^mP_l(x)}{dx^m}$$

$$= -\{l(l+1) - m(m-1)\}(1-x^2)^{m-1}\frac{d^{m-1}P_l(x)}{dx^{m-1}}$$

$$= -(l+m)(l-m+1)(1-x^2)^{m-1}\frac{d^{m-1}P_l(x)}{dx^{m-1}} \tag{7}$$

ノルムを求めよう

$$\int_{-1}^{1}[P_l^m(x)]^2\,dx = \int_{-1}^{1}(1-x^2)^m\frac{d^mP_l(x)}{dx^m}\frac{d^mP_l(x)}{dx^m}\,dx$$

部分積分を行って

$$= \left[(1-x^2)^m\frac{d^mP_l(x)}{dx^m}\frac{d^{m-1}P_l(x)}{dx^{m-1}}\right]_{-1}^{1}$$

$$-\int_{-1}^{1}\frac{d}{dx}\left\{(1-x^2)^m\frac{d^mP_l(x)}{dx^m}\right\}\frac{d^{m-1}P_l(x)}{dx^{m-1}}\,dx$$

この第１項はゼロとなる第２項は

$$= -\int_{-1}^{1}\left\{(1-x^2)^m\frac{d^{m+1}P_l(x)}{dx^{m+1}} - 2mx(1-x^2)^{m-1}\frac{d^mP_l(x)}{dx^m}\right\}\frac{d^{m-1}P_l(x)}{dx^{m-1}}\,dx$$

すでに求めておいた (7) 式を使うとノルムの二乗は

$$= \int_{-1}^{1}\left\{(l+m)(l-m+1)(1-x^2)^{m-1}\frac{d^{m-1}P_l(x)}{dx^{m-1}}\right\}\frac{d^{m-1}P_l(x)}{dx^{m-1}}\,dx$$

$$= (l+m)\,(l-m+1)\int_{-1}^{1}[P_l^{m-1}(x)]^2\,dx$$

更に m-1 回部分積分を繰り返すと

$$= (l+m)(l+m-1)\cdots(l+1)\,(l-m+1)\,(l-m+2)\cdots l\int_{-1}^{1}[P_l\,(x)]^2\,dx$$

$$= (l+m)(l+m-1)\cdots(l+1)\,\frac{l\,!}{l\,!}\,\frac{(l-m)!}{(l-m)!}\,(l-m+1)\,(l-m+2)\cdots l\,\frac{2}{2l+1}$$

$$= \frac{(l+m)!}{l\,!}\,\frac{l\,!}{(l-m)!}\,\frac{2}{2l+1} = \frac{(l+m)!}{(l-m)!}\,\frac{2}{2l+1}$$

結果を元の変数 θ に戻して

$$\int_{-1}^{1}P_l\,(x)\,P_n\,(x)\,dx = \int_{0}^{\pi}P_l\,(\cos\theta)\,P_n\,(\cos\theta)\sin\theta\,d\theta = \frac{2\,\delta_{l\,n}}{2\,l+1} \qquad (6.27)$$

と書ける。ここに δ_{ln} はクロネッカーのデルタである。

$$\int_{-1}^{1}P_l^{\,|m|}(x)\,P_n^{\,|m|}(x)\,dx = \int_{0}^{\pi}P_l^{\,|m|}(\cos\theta)\,P_n^{\,|m|}(\cos\theta)\sin\theta\,d\theta$$

$$= \frac{2}{2\,l+1}\,\frac{(l+|m|)!}{(l-|m|)!}\,\delta_{ln} \qquad (6.28)$$

規格化定数は

$$N_{l\,m} = \left[\frac{2\,l+1}{2}\,\frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}\right]^{1/2} \qquad (6.29)$$

となる。

球面調和関数は

$$Y_l^{\,m}(\theta,\phi) = N_{l\,m}\,P_l^{\,|m|}(\cos\theta)\,e^{i\,m\,\phi}\,/\sqrt{2\pi}$$

$$= \left[\frac{2\,l+1}{4\,\pi}\,\frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}\right]^{1/2} P_l^{\,|m|}(\cos\theta)\,e^{i\,m\,\phi} \qquad (6.30)$$

と書かれ、規格直交系である。

$$\int_{0}^{\pi}d\theta\sin\theta\int_{0}^{2\pi}d\phi\,Y_l^{\,m\,*}(\theta,\phi)\,Y_n^{\,k}(\theta,\phi) = \delta_{l\,n}\,\delta_{m\,k} \qquad (6.31)$$

球面調和関数の規格化について

今まで規格化については定数が正となるように取ってきた。

$\hat{H}\,\psi = E\,\psi$　ここで　$\phi = c\,\psi$　と置く（ｃは定数）と

$\hat{H}\,\phi = \hat{H}\,c\,\psi = c\,\hat{H}\,\psi = c\,E\,\psi = E\,c\,\psi = E\,\phi$　となり固有関数の定数倍も固有関数である。

規格化するのに　$\phi = N\psi$ と取り、$N = n\,e^{i\,\delta}$　と置く（位相因子）と

$$\int\phi^*\,\phi\,d\tau = \int \mathrm{N}^*\,\psi^*\,N\,\psi\,d\tau = \int n\,e^{-i\,\delta}\psi^*\,n\,e^{i\delta}\,\psi\,d\tau = n^2\int\psi^*\,\psi\,d\tau = 1$$

n を求めていた、ここでは δ は決まらない。
ルジャンドル倍関数の規格化では

$$N_{lm}^{2}\int_{-1}^{1}[\,P_l^{|m|}(x)\,]^2\,dx = N_{lm}^{2}\frac{2}{2l+1}\frac{(l+|m|)!}{(l-|m|)!} = 1 \tag{6.28}$$

$$N_{lm} = [\frac{2l+1}{2}\frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}]^{1/2} \tag{6.29}$$

と求めていた。 $N_{lm} = Ne^{i\delta}$ とすると $\delta = 0$ としていた。エネルギーや確率密度については何も問題はなかったが、$\hat{L}_+$ や $\hat{L}_-$ の演算では１回演算するごとに符号が変わるので具合が悪いので m が正の時には $\delta = m\pi$ と取れば符号の変化がない。こうすると (6.29) 式は m が正の奇数の場合のみ負でその他は正であると取ればよい。

$$N_{lm} = \left\{ \begin{array}{ll} (-1)^m\,[\frac{2l+1}{2}\frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}]^{1/2} & m>0 \\ [\frac{2l+1}{2}\frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}]^{1/2} & m<0 \end{array} \right\} \tag{6.29a}$$

球面調和関数 (6.30) も N_{lm} がかかるので N_{lm} と同じ符号と取る。

６．３　角運動量

ラプラシアンは

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}(r^2\frac{\partial}{\partial r}) + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}) + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2} \tag{6.3}$$

であることが宿題で確かめられた。剛体回転子のハミルトニヤンは

$\hat{H} = \hat{K} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2$ である。ラプラシアンはｒ一定と置くと

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}) + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2} \tag{5.50}$$

外力はないので

$$\hat{H} = \hat{K} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2\mu r^2}\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right]$$
$$= -\frac{\hbar^2}{2I}\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right]$$

運動エネルギーは$K = \frac{L^2}{2I}$ だから

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right] \tag{6.32}$$

(6.7) 式の後半を $\hbar^2\beta$ と置いたまた$\beta = l(l+1)$ であることから

$$\hat{L}^2 Y_l^m(\theta,\phi) = l(l+1)\hbar^2 Y_l^m(\theta,\phi) \tag{6.33}$$
$$L^2 = l(l+1)\hbar^2 \quad l = 0, 1, 2, \cdots \tag{6.34}$$

剛体回転子の固有値方程式は

$$\hat{H} Y_l^m(\theta,\phi) = \frac{l(l+1)\hbar^2}{2I} Y_l^m(\theta,\phi) \tag{6.35}$$

角運動量は　$\hat{L} = \hat{r} \times \hat{p}$ であり、角運動量の成分は宿題９の結果より

$$\hat{L}_x = -i\hbar\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right) = -i\hbar\left(-\sin\phi\frac{\partial}{\partial\theta} - \cot\theta\cos\phi\frac{\partial}{\partial\phi}\right)$$
$$\hat{L}_y = -i\hbar\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right) = -i\hbar\left(\cos\phi\frac{\partial}{\partial\theta} - \cot\theta\sin\phi\frac{\partial}{\partial\phi}\right) \tag{6.37}$$
$$\hat{L}_z = -i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right) = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\phi}$$

$\hat{L}_z$ の形から、$e^{im\phi}$ が $\hat{L}_z$ の固有関数であることが分かる。

$$\hat{L}_z e^{im\phi} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\phi} e^{im\phi} = m\hbar e^{im\phi}$$

球面調和関数の ϕ 依存性は $e^{im\phi}$ のみからくるので $\hat{L}_z$ を作用させると

$$\hat{L}_z Y_l^m(\theta,\phi) = N_{lm}\hat{L}_z P_l^{|m|}(\cos\theta)\, e^{im\phi}/\sqrt{2\pi}$$
$$= N_{lm} P_l^{|m|}(\cos\theta)\,(m\hbar)\, e^{im\phi}/\sqrt{2\pi}$$
$$= m\hbar Y_l^m(\theta,\phi) \tag{6.38}$$

となるので球面調和関数もまた $\hat{L}_z$ の固有関数である。

$\hat{L}_z^2$ を作用させると

$$\hat{L}_z^2 Y_l^m(\theta,\phi) = \hat{L}_z m\hbar Y_l^m(\theta,\phi) = m^2\hbar^2 Y_l^m(\theta,\phi) \tag{6.39}$$

となる。それで

$$(\hat{L}^2 - \hat{L}_z^2)\, Y_l^m(\theta,\phi) = [\,l(l+1)\hbar^2 - m^2\hbar^2]Y_l^m(\theta,\phi) \tag{6.40}$$

$\hat{L}^2 - \hat{L}_z^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2$ であるから

$$(\hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2)\, Y_l^m(\theta,\phi) = [\,l(l+1) - m^2]\hbar^2 Y_l^m(\theta,\phi)$$

となる。$L_x^2 + L_y^2$ の実測値は $[\,l(l+1) - m^2]\hbar^2$ となるが、これは負にはなれない。

$[\,l(l+1) - m^2]\hbar^2 \geq 0$ より

$$l(l+1) \geq m^2 \tag{6.41}$$

l と m は整数だから

$\left| m \right| \leq l$

となり、m の可能な値は

$$m = 0,\ \pm 1,\ \pm 2,\ \cdots,\ \pm l \qquad (6.42)$$

ということになる。各 l に対して $2l+1$ 個の m の値がある。

角運動量の二乗値は

$$L^2 = l(l+1)\hbar^2$$

であるから、角運動量の大きさは

$$\left| L \right| = \sqrt{l(l+1)}\,\hbar$$

であり、$\left| L \right| \neq l\hbar$ であることに注意する。常に $\left| L \right| > \left| L_z \right|$ となるので、L と L_z とは同一方向を向けない

$l = 1$ の場合

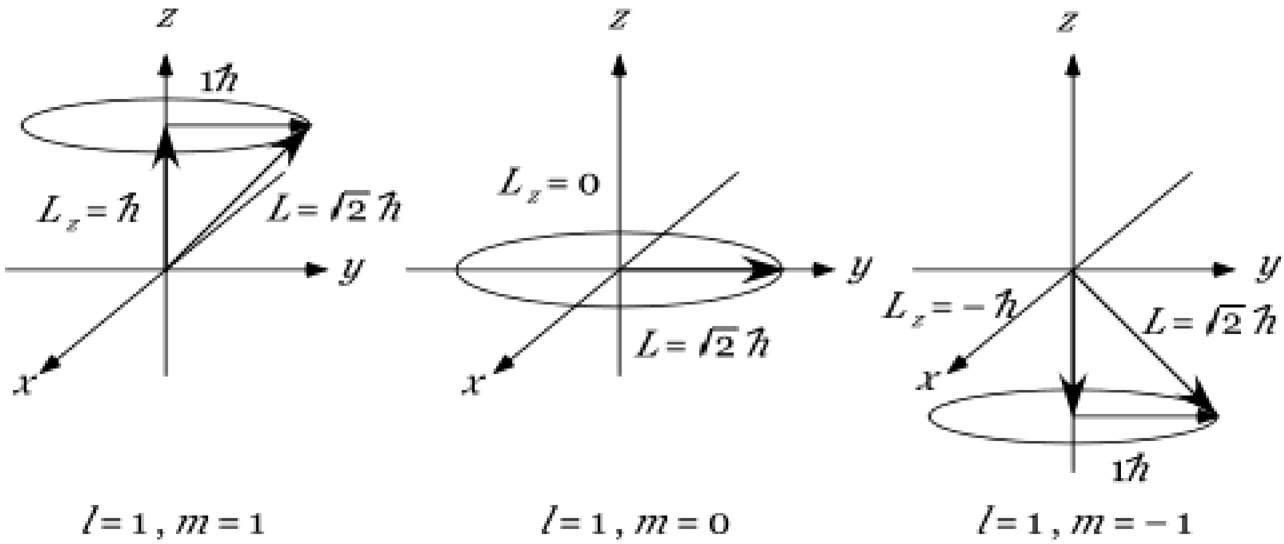
$$\hat{L}^2 Y_1^m = 1(1+1)\hbar^2 Y_1^m = 2\hbar^2 Y_1^m \quad (m = 0,\ \pm 1)$$

および

$$\hat{L}_z Y_1^m = m\hbar Y_1^m \quad (m = 0,\ \pm 1)$$

である。

各 m についての L と L_z との関係を図示すると次のようになる。



2p 状態の角運動量と角運動量のｚ成分の関係。角運動量は図中の円周上のどこかに有るが、位置は特定できない（不確定性原理）