量子力学

第10回目（6/20）

2AM　前期木曜2限

先進工学部マテリアル創成工学科　田村隆治

tamura☺rs.tus.ac.jp

認証コード：****

今回の授業で身に付くこと

交換関係から、陽子の周りを回転する電子の回転軸は確定しないことを理解する。

確定させることができるのは、角運動量の大きさとその一成分だけであることを理解する。

s,p,d,f軌道の名称は角運動量の大きさを表すことを理解する。

第10回目で学ぶ内容

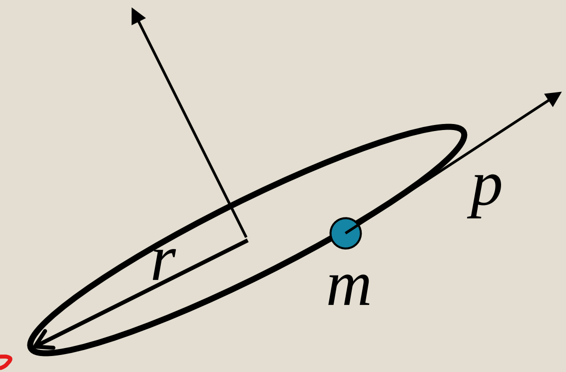
一粒子の回転運動に関して、時間に依存しないSchrödinger方程式とその解法を学ぶ。特に、角運動量の交換関係のみからエネルギー固有値が得られることを理解する。

1粒子の回転運動

回転軸 $\parallel \boldsymbol{l}$

$$\boldsymbol{l} = \left(l_x, l_y, l_z\right)$$

半径rで回転する質量mの粒子の運動エネルギー



古典論　　運動エネルギー　$E = \dfrac{p^2}{2m}$

角運動量　$\boldsymbol{l} = \boldsymbol{r} \times \boldsymbol{p}$

角運動量の大きさ　$l = rp$

古典力学

運動エネルギー　$E = \dfrac{l^2}{2mr^2} = \dfrac{l^2}{2I}$　　$I \equiv mr^2$:慣性モーメント

量子力学に移行

回転運動のハミルトニアン　$\boxed{\hat{H} = \dfrac{\hat{l}^2}{2I}}$　　$\hat{l}^2$:角運動量二乗演算子

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

時間に依存しない
Schrödinger方程式

Hを代入

$$\boxed{\frac{\hat{l}^2}{2I}\left|\Psi\right\rangle = E\left|\Psi\right\rangle} \qquad \boxed{\therefore \hat{l}^2\left|\Psi\right\rangle = 2IE\left|\Psi\right\rangle}$$

$l = 0, 1, 2, 3,$
$\downarrow \; \downarrow \; \downarrow \; \downarrow$
s　p　d　f

1粒子の回転　$\hat{l}^2$　の固有値と固有関数を求めることに帰着する。

角運動量演算子

古典的角運動量　$\boldsymbol{l} = \boldsymbol{r} \times \boldsymbol{p} = (yp_z - zp_y, zp_x - xp_z, xp_y - yp_x)$

定義1　$\boxed{\hat{l}_x = y\hat{p}_z - z\hat{p}_y \quad \hat{l}_y = z\hat{p}_x - x\hat{p}_z \quad \hat{l}_z = x\hat{p}_y - y\hat{p}_x}$

※この定義を使う量子力学の教科書もあるが、この授業では角運動量演算子の交換関係により角運動量演算子を定義する。その理由は後で述べる。

$l^2 = l_x^2 + l_y^2 + l_z^2$　　$\hat{l}^2 = \hat{l}_x^2 + \hat{l}_y^2 + \hat{l}_z^2$

※交換子の性質

$$[\hat{A}, \hat{A}] = \hat{A}^2 - \hat{A}^2 = 0$$

$$[\hat{B}, \hat{A}] = \hat{B}\hat{A} - \hat{A}\hat{B} = -[\hat{A}, \hat{B}]$$

$$[\hat{A} + \hat{B}, \hat{C}] = (\hat{A} + \hat{B})\hat{C} - \hat{C}(\hat{A} + \hat{B}) = [\hat{A}, \hat{C}] + [\hat{B}, \hat{C}]$$

$$[\hat{A} - \hat{B}, \hat{C}] = (\hat{A} - \hat{B})\hat{C} - \hat{C}(\hat{A} - \hat{B}) = [\hat{A}, \hat{C}] - [\hat{B}, \hat{C}]$$

$$[\hat{A}, \hat{B} + \hat{C}] = \hat{A}(\hat{B} + \hat{C}) - (\hat{B} + \hat{C})\hat{A} = [\hat{A}, \hat{B}] + [\hat{A}, \hat{C}]$$

$$[\hat{A}, \hat{B} - \hat{C}] = \hat{A}(\hat{B} - \hat{C}) - (\hat{B} - \hat{C})\hat{A} = [\hat{A}, \hat{B}] - [\hat{A}, \hat{C}]$$

$$[\hat{A}\hat{B}, \hat{C}] = \hat{A}\hat{B}\hat{C} - \hat{C}\hat{A}\hat{B} = \hat{A}\hat{B}\hat{C} - \hat{A}\hat{C}\hat{B} + \hat{A}\hat{C}\hat{B} - \hat{C}\hat{A}\hat{B}$$
$$= \hat{A}[\hat{B}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{C}]\hat{B}$$

特に、$\hat{A} = \hat{B}$の場合、$[\hat{A}^2, \hat{C}] = \hat{A}[\hat{A}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{C}]\hat{A}$

例題:角運動量演算子が次の交換関係を満足することを示せ。（15分）

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

角運動量演算子

$$\hat{l}_x = y\hat{p}_z - z\hat{p}_y$$

$$\hat{l}_y = z\hat{p}_x - x\hat{p}_z$$

$$\hat{l}_z = x\hat{p}_y - y\hat{p}_x$$

運動量演算子

$$\hat{p}_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$$

$$\hat{p}_y = -i\hbar\frac{\partial}{\partial z}$$

$$\hat{p}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial z}$$

例題：角運動量演算子が次の交換関係を満足することを示せ。（15分）

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

$$[\hat{l}_x, \hat{l}_y] = [y\hat{p}_z - z\hat{p}_y, z\hat{p}_x - x\hat{p}_z]$$

$$= [y\hat{p}_z, z\hat{p}_x - x\hat{p}_z] - [z\hat{p}_y, z\hat{p}_x - x\hat{p}_z]$$

$$= [y\hat{p}_z, z\hat{p}_x] - \cancel{[y\hat{p}_z, x\hat{p}_z]} - \cancel{[z\hat{p}_y, z\hat{p}_x]} + [z\hat{p}_y, x\hat{p}_z]$$

$$= [y\hat{p}_z, z\hat{p}_x] + [z\hat{p}_y, x\hat{p}_z]$$

?

$$= y\hat{p}_z(z\hat{p}_x) - z\hat{p}_x(y\hat{p}_z) + z\hat{p}_y(x\hat{p}_z) - x\hat{p}_z(z\hat{p}_y)$$

$$= y\hat{p}_x[\hat{p}_z, z] + x\hat{p}_y[z, \hat{p}_z]$$

$$= -i\hbar y\hat{p}_x + i\hbar x\hat{p}_y$$

$$= i\hbar\hat{l}_z$$

$\because$ $[y\hat{p}_z, x\hat{p}_z] = yx\hat{p}_z{}^2 - xy\hat{p}_z{}^2 = 0$など

$\because$ $\hat{p}_z = -i\hbar\dfrac{\partial}{\partial z}$

$\because$ $\hat{l}_z = x\hat{p}_y - y\hat{p}_x$

$$\therefore [\hat{l}_x, \hat{l}_y] = i\hbar\hat{l}_z$$

同様にして、 $[\hat{l}_y, \hat{l}_z] = i\hbar\hat{l}_x$ $\quad [\hat{l}_z, \hat{l}_x] = i\hbar\hat{l}_y$

※このように角運動量の各成分は互いに交換しない。従って、同時固有状態が存在しない。確定させることができるのは角運動量の一成分だけである。

$[\hat{P}, \hat{Q}] \neq 0$ PとQの両方が確定した状態は存在しない。

角運動量演算子の定義

定義2 $\boxed{[\hat{l}_x, \hat{l}_y] = i\hbar\hat{l}_z \quad [\hat{l}_y, \hat{l}_z] = i\hbar\hat{l}_x \quad [\hat{l}_z, \hat{l}_x] = i\hbar\hat{l}_y}$

※定義1はもちろん定義2を満足する。定義2は位置に関する微分を含まないため、スピンのように位置の関数として表せない状態も取り込むことができる。

角運動量二乗演算子

$$\boxed{\hat{l}^2 = \hat{l}_x^2 + \hat{l}_y^2 + \hat{l}_z^2}$$

$$\because [\hat{A}^2, \hat{C}] = \hat{A}[\hat{A}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{C}]\hat{A}$$

?

交換関係
$$\begin{aligned}
[\hat{l}^2, \hat{l}_z] &= [\hat{l}_x^2 + \hat{l}_y^2 + \hat{l}_z^2, \hat{l}_z] = [\hat{l}_x^2, \hat{l}_z] + [\hat{l}_y^2, \hat{l}_z] \\
&= \hat{l}_x[\hat{l}_x, \hat{l}_z] + [\hat{l}_x, \hat{l}_z]\hat{l}_x + \hat{l}_y[\hat{l}_y, \hat{l}_z] + [\hat{l}_y, \hat{l}_z]\hat{l}_y \\
&= \hat{l}_x(-i\hbar\hat{l}_y) + (-i\hbar\hat{l}_y)\hat{l}_x + \hat{l}_y(i\hbar\hat{l}_x) + (i\hbar\hat{l}_x)\hat{l}_y = 0
\end{aligned}$$

同様に、$[\hat{l}^2, \hat{l}_x] = [\hat{l}^2, \hat{l}_y] = 0$

角運動量間の交換関係

$$\boxed{\begin{aligned}
&[\hat{l}_x, \hat{l}_y] = i\hbar\hat{l}_z \quad [\hat{l}_y, \hat{l}_z] = i\hbar\hat{l}_x \quad [\hat{l}_z, \hat{l}_x] = i\hbar\hat{l}_y \\
&[\hat{l}^2, \hat{l}_z] = [\hat{l}^2, \hat{l}_x] = [\hat{l}^2, \hat{l}_y] = 0
\end{aligned}}$$

角運動量間の交換関係

$\hat{l}_x$、$\hat{l}_y$、$\hat{l}_z$は互いに交換しない。

従って、確定させることができるのはl_x、l_y、l_zのうちのどれか１つとなる。
慣習的に$\hat{l}_z$が確定した状態（$\hat{l}_z$の固有状態）を考える。

※このように、古典力学と異なり、量子力学では、回転軸が確定しない！

$\hat{l}_z$と$\hat{l}^2$は交換するので同時固有状態が存在する。

$\hat{l}^2$と$\hat{l}_z$の同時固有状態

同時固有状態を$|\lambda m\rangle$とする。

$$\boxed{\begin{aligned}\hat{l}^2|\lambda m\rangle &= \lambda\hbar^2|\lambda m\rangle \\ \hat{l}_z|\lambda m\rangle &= m\hbar|\lambda m\rangle\end{aligned}}$$

λ, m：実数

※実数λ, mを無次元化した。各自、角運動量の次元が、J・sであることを確かめよ。
※λ, mが実数なのは、$\hat{l}^2$と$\hat{l}_z$がエルミート演算子であるため。（本日のレポート課題）

一粒子の回転を表すSchrödinger方程式

$$\frac{\hat{l}^2}{2I}|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle$$

$|\lambda m\rangle$はそのままS.E.の解となる。

※従って、固有ケット$|\lambda m\rangle$と固有値$\lambda\hbar^2$を求める問題に帰着した。

昇降演算子の導入

$$\boxed{\hat{l}_\pm \equiv \hat{l}_x \pm i\hat{l}_y}$$

※後で見るように、$\hat{l}_z$の固有値を上げ下げする演算子

角運動量との交換関係 $\left[\hat{l}_z, \hat{l}_\pm\right] = \pm\hbar\hat{l}_\pm$ $\left[\hat{l}^2, \hat{l}_\pm\right] = 0$

$$[\hat{l}_z, \hat{l}_\pm] = [\hat{l}_z, \hat{l}_x \pm i\hat{l}_y] = [\hat{l}_z, \hat{l}_x] \pm i[\hat{l}_z, \hat{l}_y] = i\hbar\hat{l}_y \pm i(-i\hbar\hat{l}_x)$$
$$= \pm\hbar\hat{l}_x + i\hbar\hat{l}_y = \pm\hbar\hat{l}_\pm$$

$$[\hat{l}^2, \hat{l}_\pm] = [\hat{l}^2, \hat{l}_x \pm i\hat{l}_y] = [\hat{l}^2, \hat{l}_x] \pm i[\hat{l}^2, \hat{l}_y] = 0$$

角運動量二乗

$$\boxed{\begin{aligned}\hat{l}^2 &= \hat{l}_-\hat{l}_+ + \hbar\hat{l}_z + \hat{l}_z^{\,2} \\ \hat{l}^2 &= \hat{l}_+\hat{l}_- - \hbar\hat{l}_z + \hat{l}_z^{\,2}\end{aligned}}$$

$$\because [\hat{l}_x, \hat{l}_y] = i\hbar\hat{l}_z$$

$$\hat{l}_-\hat{l}_+ = \left(\hat{l}_x - i\hat{l}_y\right)\left(\hat{l}_x + i\hat{l}_y\right) = \hat{l}_x^{\,2} + \hat{l}_y^{\,2} + i\left(\hat{l}_x\hat{l}_y - \hat{l}_y\hat{l}_x\right) = \hat{l}_x^{\,2} + \hat{l}_y^{\,2} - \hbar\hat{l}_z = \hat{l}^2 - \hbar\hat{l}_z - \hat{l}_z^{\,2}$$
$$\hat{l}_+\hat{l}_- = \left(\hat{l}_x + i\hat{l}_y\right)\left(\hat{l}_x - i\hat{l}_y\right) = \hat{l}_x^{\,2} + \hat{l}_y^{\,2} - i\left(\hat{l}_x\hat{l}_y - \hat{l}_y\hat{l}_x\right) = \hat{l}_x^{\,2} + \hat{l}_y^{\,2} + \hbar\hat{l}_z = \hat{l}^2 + \hbar\hat{l}_z - \hat{l}_z^{\,2}$$

昇降演算子の性質

$\hat{l}_z$と$\hat{l}^2$の同時固有状態を$|\lambda m\rangle$とする。すなわち、

$$\hat{l}^2|\lambda m\rangle = \lambda\hbar^2|\lambda m\rangle \qquad \lambda, m: \text{実数}$$

$$\hat{l}_z|\lambda m\rangle = m\hbar|\lambda m\rangle$$

$\hat{l}_\pm|\lambda m\rangle$は$\hat{l}_z$と$\hat{l}^2$の同時固有状態であり、以下の式が成り立つ。

$$\hat{l}^2\left(\hat{l}_\pm|\lambda m\rangle\right) = \lambda\hbar^2\left(\hat{l}_\pm|\lambda m\rangle\right)$$

$$\hat{l}_z\left(\hat{l}_\pm|\lambda m\rangle\right) = (m \pm 1)\hbar\left(\hat{l}_\pm|\lambda m\rangle\right)$$

$\hat{l}_\pm$は$\hat{l}^2$の固有値を変えずに$\hat{l}_z$の固有値のみ±1変化させる演算子

証明

$$\hat{l}^2\left(\hat{l}_\pm|\lambda m\rangle\right) = \hat{l}_\pm\underbrace{\hat{l}^2|\lambda m\rangle}_{=\lambda\hbar^2|\lambda m\rangle} = \lambda\hbar^2\left(\hat{l}_\pm|\lambda m\rangle\right)$$

$$\hat{l}_\pm\hat{l}_z|\lambda m\rangle = m\hbar\hat{l}_\pm|\lambda m\rangle \qquad \because \left[\hat{l}_z, \hat{l}_\pm\right] = \pm\hbar\hat{l}_\pm$$

$$(\text{左辺}) = \left(\left[\hat{l}_\pm, \hat{l}_z\right] + \hat{l}_z\hat{l}_\pm\right)|\lambda m\rangle = \left(\mp\hbar\hat{l}_\pm + \hat{l}_z\hat{l}_\pm\right)|\lambda m\rangle$$

$$\therefore m\hbar\hat{l}_\pm|\lambda m\rangle = \hat{l}_z\hat{l}_\pm|\lambda m\rangle \mp \hbar\hat{l}_\pm|\lambda m\rangle$$

$$\therefore \hat{l}_z\hat{l}_\pm|\lambda m\rangle = (m \pm 1)\hbar\hat{l}_\pm|\lambda m\rangle$$

$\hat{l}_\pm$: $\hat{l}_z$の固有状態
固有値 $(m\pm1)\hbar$

エルミート演算子の二乗の期待値

$$\langle\Psi|\hat{P}^2|\Psi\rangle = \langle\hat{P}\Psi|\hat{P}\Psi\rangle = \int\left|\hat{P}\Psi\right|^2 dx \geq 0$$

$\therefore \boxed{\langle\Psi|\hat{P}^2|\Psi\rangle \geq 0}$ エルミート演算子の二乗の期待値はつねに非負

従って、$\langle\lambda m|\hat{l}^2|\lambda m\rangle = \lambda\hbar^2 \geq 0 \quad \therefore \lambda \geq 0$

一方、 $\langle\lambda m|\hat{l}^2|\lambda m\rangle = \langle\lambda m|\hat{l}_x^2|\lambda m\rangle + \langle\lambda m|\hat{l}_y^2|\lambda m\rangle + \langle\lambda m|\hat{l}_z^2|\lambda m\rangle$

$$\langle\lambda m|\hat{l}^2|\lambda m\rangle - \langle\lambda m|\hat{l}_z^2|\lambda m\rangle = \langle\lambda m|\hat{l}_x^2|\lambda m\rangle + \langle\lambda m|\hat{l}_y^2|\lambda m\rangle \geq 0$$

$$\therefore \lambda\hbar^2 - m^2\hbar^2 \geq 0 \qquad \therefore m^2 \leq \lambda$$

従って、実数mには最大・最小がある。そこで、mの最大値をlとする。

もし$\hat{l}_+|\lambda l\rangle \neq 0$だと、 $\hat{l}_+|\lambda l\rangle$は$m = l + 1$の固有関数であり、$l$が最大値であることと矛盾。

従って、$\hat{l}_+|\lambda l\rangle = 0$ 両辺に$\hat{l}_-$を掛けて、 $\hat{l}_-\hat{l}_+|\lambda l\rangle = 0$

$$\hat{l}_-\hat{l}_+|\lambda l\rangle = \left(\hat{l}^2 - \hbar\hat{l}_z - \hat{l}_z{}^2\right)|\lambda l\rangle = (\lambda\hbar^2 - \hbar l\hbar - l^2\hbar^2)|\lambda l\rangle$$

$$= \hbar^2\big(\lambda - l(l+1)\big)|\lambda l\rangle = 0 \qquad \because \hat{l}_-\hat{l}_+ = \hat{l}^2 - \hbar\hat{l}_z - \hat{l}_z{}^2$$

$\therefore \boxed{\lambda = l(l+1)}$ l : mの最大値

実数mには最小値も存在するので、$|\lambda l\rangle(\neq 0)$に$\hat{l}_-$を作用し続けると、どこかでゼロにならなければならない。そこで、$|\lambda l\rangle$に$\hat{l}_-$を$(n+1)$回作用させたときはじめてゼロになるものとする。$|\lambda l\rangle \neq 0$なので$n \geq 0$である。

$$\hat{l}_-^{n+1}|\lambda l\rangle = 0 \quad \hat{l}_-^{n}|\lambda l\rangle \neq 0 \qquad n = 0,1,2,\ldots$$

ここで、$\hat{l}_-^{n}|\lambda l\rangle$の固有値を調べる。

$$\begin{aligned}
\hat{l}^2\left(\hat{l}_-^{n}|\lambda l\rangle\right) &= \left(\hat{l}_+\hat{l}_- - \hbar\hat{l}_z + \hat{l}_z^2\right)\hat{l}_-^{n}|\lambda l\rangle \\
&= [-(l-n)\hbar^2 + (l-n)^2\hbar^2]\hat{l}_-^{n}\,|\lambda l\rangle \qquad \because\ \hat{l}_-^{n+1}\,|\lambda l\rangle = 0 \\
&= (l-n)(l-n-1)\hbar^2\left(\hat{l}_-^{n}|\lambda l\rangle\right)
\end{aligned}$$

$\hat{l}_-$は$\hat{l}^2$の固有値を変えないので、$(l-n)(l-n-1) = \lambda$

$\lambda = l(l+1)$より、

$$(l-n)(l-n-1) = l(l+1), \therefore n^2 + n = 2l + 2nl \qquad \therefore \boxed{l = \frac{n}{2}}$$

$n = 0,1,2,\ldots$ なので、 $l = 0,\frac{1}{2},1,\frac{3}{2},2,\ldots$ lは整数もしくは半整数

mの最小値は $l - n = l - 2l = -l$

以上より、mの取り得る値は $\boxed{m = -l, -l+1, \cdots, l-1, l}$ $2l+1$ 個

mはこれで尽くされているか

補助資料

上昇演算子を作用させるとゼロになるmの条件を調べる。

$$\hat{l}_{+}\left|\lambda m\right\rangle = 0 \qquad \lambda = l(l+1) \qquad l : m\text{の最大値}$$

左から下降演算子を掛けて

$$\hat{l}_{-}\hat{l}_{+}\left|\lambda m\right\rangle = \left(\hat{l}^{2} - \hbar\hat{l}_{z} - \hat{l}_{z}^{\,2}\right)\left|\lambda m\right\rangle = \left(\lambda\hbar^{2} - \hbar m\hbar - m^{2}\hbar^{2}\right)\left|\lambda m\right\rangle$$

$$= \hbar^{2}\left(\lambda - m - m^{2}\right)\left|\lambda m\right\rangle = 0 \qquad \therefore \lambda = m^{2} + m$$

$\lambda = l(l+1)$より、$(l-m)(l+m+1) = 0$

$(l-m)(l+m+1) \therefore m = l$、もしくは、 $m = -l-1$

mの最小値は$-l$なので、上昇演算子を作用してゼロになるのは
$m = l$のときのみ。

従って、mの値はlから自然数を引いた値でなければならない。
でないと、$\hat{l}_{+}$を作用させていったときにmの値が無限に増加することになる。（lが最大値であることと矛盾する）

以上より、mの値は以下の値に限られる。

$$\boxed{m = -l, -l+1, \cdots, l-1, l}$$

古典的な回転運動の場合

角運動量z成分の演算子（極座標表示）

$$\hat{l}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi}$$

※導出方法は補助資料を参照のこと。

固有値方程式 $\hat{l}_z \left| m \right\rangle = m\hbar \left| m \right\rangle$

固有関数 $\Psi_m(\phi) = Ce^{im\phi}$ $\because -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} \Psi_m = -i\hbar Cime^{im\varphi} = m\hbar \Psi_m$

ϕと$\phi + 2\pi$は同じ位置なので、波動関数の一価性を要請する。

$$\Psi_m(\phi + 2\pi) = \Psi_m(\phi)$$

$$e^{im\phi} = e^{im(\phi + 2\pi)} \qquad e^{2\pi mi} = 1 \qquad m: \text{整数}$$

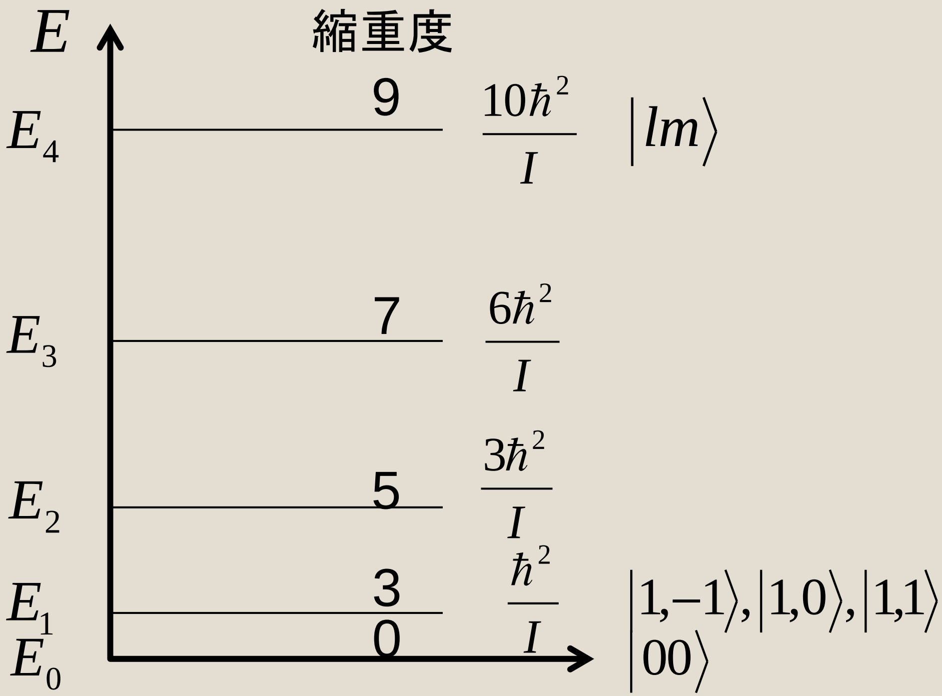
$$\hat{\boldsymbol{l}}^2 \left| lm \right\rangle = l(l+1)\hbar^2 \left| lm \right\rangle \qquad l = 0,1,2,3,\ldots$$

古典的な軌道運動の場合はlは整数に限られる。

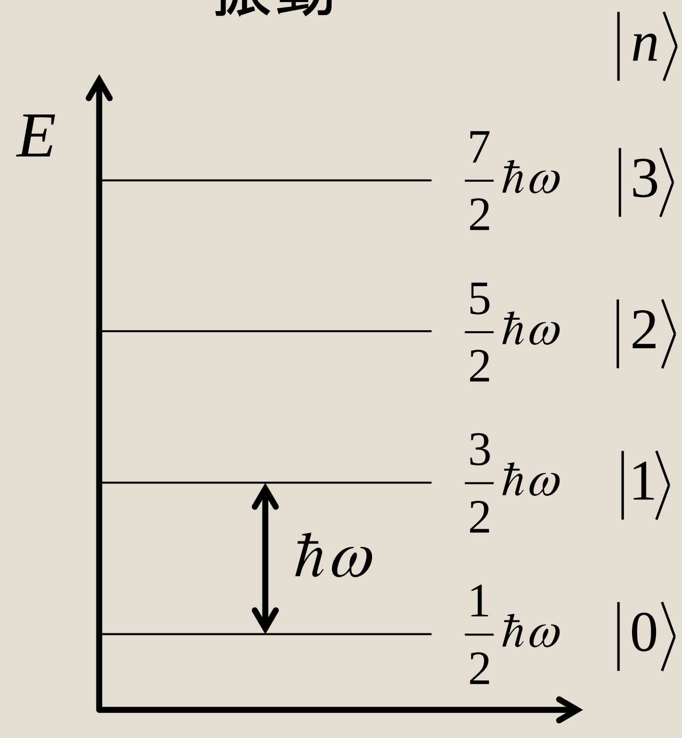
回転運動 $\hat{H}=\dfrac{\hat{l}^2}{2I}$ $\quad \hat{H}|lm\rangle=\dfrac{1}{2I}l(l+1)\hbar^2|lm\rangle$

固有ケット	$|lm\rangle$	$l=0,1,2,3,\ldots \quad m=-l,l+1,\ldots,l-1,l$
固有値	$E_l=\dfrac{1}{2I}l(l+1)\hbar^2$	$(2l+1)$重縮退

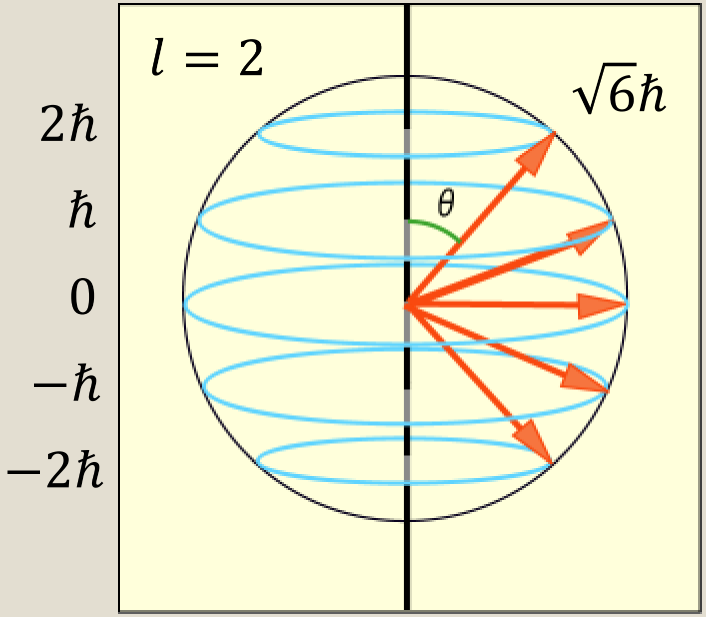
回転



振動



方向量子化



$|lm\rangle$: 角運動量二乗と角運動量z成分の同時固有状態

角運動量二乗　$l(l+1)\hbar^2$

角運動量z成分　$m\hbar$

角運動量のx成分とy成分は不確定となる。
（測定すると固有値$m\hbar$のどれか一つが得られる）

角運動量について確定できるのは大きさと一成分のみなので、古典的に考えると上図のようになる。角運動量ベクトルの終端が水色の円上のどこかにあり、定まらない。（測定するとどこかで見い出される）

また図からわかるように、角運動量は任意の方向を向くことができない。
このように角運動量の向きが制限されることを、方向の量子化という。

電子の名前の付け方

補助資料

中心力ポテンシャルの場合

ハミルトニアン、角運動量二乗演算子、角運動量z成分演算子は互いに交換する。すなわち、

$$[\hat{H}, \hat{l}^2] = 0 \qquad [\hat{H}, \hat{l}_z] = 0 \qquad [\hat{l}^2, \hat{l}_z] = 0$$

従って、同時固有状態$|nlm\rangle$が存在する。

$$\hat{H}|nlm\rangle = E_n|nlm\rangle \qquad n:\text{主量子数}$$

$$\hat{l}^2|nlm\rangle = a_l|nlm\rangle \qquad l:\text{方位量子数}$$

$$\hat{l}_z|nlm\rangle = b_m|nlm\rangle \qquad m:\text{磁気量子数}$$

※角運動量は一成分しか指定できないことに注意。

中心力ポテンシャル中の電子は、エネルギー、角運動量の大きさ、そのz成分の3つで過不足なく指定される。また、これ以上指定することはできない。

※正確にはスピン量子数sが加わって4つとなる。

第10回目のまとめ

以下の内容を良く消化して、説明できるようにしましょう。

一粒子の回転を表す時間に依存しないSchrödinger方程式

$$\frac{\hat{l}^2}{2I}\left|\Psi\right\rangle = E\left|\Psi\right\rangle \qquad I \equiv mr^2$$ ：慣性モーメント

一般の角運動量（定義）

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

角運動量の二乗、そのz成分の固有値

$$\hat{l}^2\left|lm\right\rangle = l(l+1)\hbar^2\left|lm\right\rangle \qquad l=0,\frac{1}{2},1,\frac{3}{2},2,\ldots$$

$$\hat{l}_z\left|lm\right\rangle = m\hbar\left|lm\right\rangle \qquad m=-l,-l+1,\cdots,l-1,l \qquad 2l+1 \text{ 個}$$

※軌道運動の場合はlは整数に限られる。

レポート課題（40分）

1. $\hat{P}$、$\hat{Q}$ をエルミート演算子とする。$\hat{P} \pm \hat{Q}$もエルミート演算子になることを示せ。さらに、$\hat{P}$、$\hat{Q}$ が可換なら、$\hat{P}\hat{Q}$ もエルミート演算子になることを示せ。

2. 1の結果を用いて、$\hat{l}_x(\equiv y\hat{p}_z - z\hat{p}_y), \hat{l}_y, \hat{l}_z$がエルミート演算子であることを示せ。

3. 1と2の結果を用いて、$\hat{l}^2$ がエルミート演算子であることを示せ。

ヒント>>tamura☺rs.tus.ac.jpまで

※提出方法

〆切：6/26(水)　　提出先：LETUS

フォーマット：手書き・ワープロいずれも可

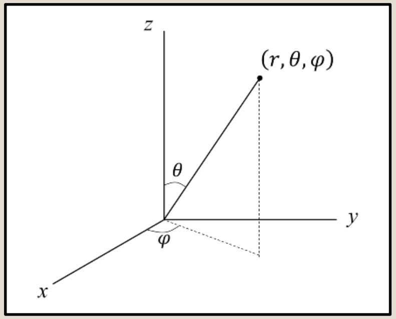
ファイル形式：PDF　　ファイル名書式：”82xxxxx材料太郎.pdf”

角運動量z成分演算子の極座標表示

補助資料

極座標表示

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



$$\frac{\partial}{\partial x} = \sin\theta\cos\phi\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos\theta\cos\phi}{r}\frac{\partial}{\partial\theta} - \frac{\sin\phi}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}$$

$$\frac{\partial}{\partial y} = \sin\theta\sin\phi\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos\theta\sin\phi}{r}\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{\cos\phi}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}$$

$$l_z = i\hbar\left(y\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial y}\right)$$
$$= i\hbar r\sin\theta\left(\sin\theta\sin\phi\cos\phi\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos\theta\sin\phi\cos\phi}{r}\frac{\partial}{\partial\theta} - \frac{\sin^2\phi}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\right.$$
$$\left.-\sin\theta\sin\phi\cos\phi\frac{\partial}{\partial r} - \frac{\cos\theta\sin\phi\cos\phi}{r}\frac{\partial}{\partial\theta} - \frac{\cos^2\phi}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\right) = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\phi}$$