軌道角運動量

- 角運動量

古典力学：粒子の角運動量　$\boldsymbol{L}$

$$\boldsymbol{L} = \boldsymbol{r} \times \boldsymbol{P}$$

位置ベクトル

運動量

$$\boldsymbol{P} = m\boldsymbol{v}$$

$$\begin{pmatrix} L_x \\ L_y \\ L_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} P_x \\ P_y \\ P_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{e}_1 & \boldsymbol{e}_2 & \boldsymbol{e}_3 \\ x & y & z \\ P_x & P_y & P_z \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} yP_z - zP_y \\ zP_x - xP_z \\ xP_y - yP_x \end{pmatrix}$$

量子力学：角運動量表示

$$\boldsymbol{P} = -i\hbar\boldsymbol{\nabla}$$

$$\begin{pmatrix} P_x \\ P_y \\ P_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -i\hbar\dfrac{\partial}{\partial x} \\ -i\hbar\dfrac{\partial}{\partial y} \\ -i\hbar\dfrac{\partial}{\partial z} \end{pmatrix}$$

軌道角運動量

$$\therefore \quad L_x = yP_x - zP_y = \left\{y\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial z}\right) - z\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial y}\right)\right\} = -i\hbar\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right)$$

$$= -i\hbar\left\{(r sin\theta sin\phi)\left(cos\phi\frac{\partial}{\partial r} - \frac{sin\theta}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}\right) - r cos\phi\left(sin\theta sin\phi\frac{\partial}{\partial r} + \frac{cos\theta sin\phi}{r}\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{cos\phi}{r sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\right)\right\}$$

$$= -i\hbar\left\{-sin\phi(sin^2\theta + cos^2\theta)\frac{\partial}{\partial\theta} - \frac{cos\phi}{tan\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\right\} = i\hbar\left(sin\phi\frac{\partial}{\partial\theta} + cot\theta cos\phi\frac{\partial}{\partial\phi}\right)$$

同様にして

$$L_y = i\hbar\left(-cos\phi\frac{\partial}{\partial\theta} + cot\theta sin\phi\frac{\partial}{\partial\phi}\right)$$

$$L_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\phi}$$

Report①：式の導出

(L_x, L_y, L_z)

これらを用いて

$$\boldsymbol{L}^2 = L_x^2 + L_x^2 + L_x^2 = -\hbar^2\left[\frac{1}{sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right] \equiv -\hbar^2\boldsymbol{\Lambda}$$

$$\boldsymbol{\Lambda} \equiv -\frac{\boldsymbol{L}}{\hbar^2}$$

軌道角運動量

ここで

$$\left\{\frac{1}{sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right\}\mathrm{Y}(\theta,\phi)+\lambda\mathrm{Y}(\theta,\phi)=0$$

$\lambda = l(l+1) \quad (l = 0,1,2,3,\cdots)$

l ：方位量子数（角運動量量子数）

$$\boxed{\Lambda\mathrm{Y}(\theta,\phi)+\lambda\mathrm{Y}(\theta,\phi)=0}$$

$$\Leftrightarrow \left\{-\frac{L^2}{\hbar^2}+l(l+1)\right\}\mathrm{Y}(\theta,\phi)=0$$

$$\boxed{L^2\,\underbrace{\mathrm{Y}(\theta,\phi)}_{\text{固有関数}}=\underbrace{l(l+1)\hbar^2}_{\text{固有値}}\underbrace{\mathrm{Y}(\theta,\phi)}_{\text{固有関数}}}$$

中心力の場合, Schrödinger eq. の解についてθ,ϕ 依存部分$Y_{lm}(\theta,\phi)$ が$\boldsymbol{L}^2$の固有値であり, $\boldsymbol{L}^2$の固有値は$l(l+1)\hbar^2\ (l=0,1,2,\cdots)$である.

$Y_{lm}(\theta,\phi)$ で与えられる量子状態に体系があるとき, 角運動量の2乗を測定する実験を行えば, 必ず$l(l+1)\hbar^2\ (l=0,1,2,\cdots)$という値が得られる.

軌道角運動量

- L_zについて

$$L_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\phi} \qquad \mathrm{Y}_{lm}(\theta,\phi) = \Theta(\theta)\Phi(\phi)$$

L_zはϕのみの演算子であるので$\Phi(\phi)$のみを考えて

$$\therefore \quad L_z\mathrm{Y}_{lm}(\theta,\phi) = \Theta(\theta)L_z\Phi(\phi) = \Theta(\theta)\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial\phi}\right)\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{-im\phi}$$

$$= m\hbar\Theta(\theta)\Phi(\phi) = m\hbar\mathrm{Y}_{lm}(\theta,\phi)$$

$$\therefore \quad \boxed{L_z\underbrace{\mathrm{Y}_{lm}(\theta,\phi)}_{\text{固有関数}} = \underbrace{m\hbar}_{\text{固有値}}\underbrace{\mathrm{Y}_{lm}(\theta,\phi)}_{\text{固有関数}}}$$

$(m = 0, \pm1, \pm2, \pm3 \cdots)$：磁気量子数

➡ 体系が$\Phi_m = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{-im\phi}$を因子にもつ波動関数で与えられる量子状態にある時,角運動量のz成分を測定する実験を行えば, 必ず$m\hbar$という値が得られる.

軌道角運動量

$$\begin{cases} L^2\,\mathrm{Y}(\theta,\phi) = l(l+1)\hbar^2\mathrm{Y}(\theta,\phi) \\ L_z\mathrm{Y}_{lm}(\theta,\phi) = m\hbar^2\mathrm{Y}_{lm}(\theta,\phi) \end{cases}$$

$l \geq |m|$　　l：方位量子数

m：磁気量子数

$\mathrm{Y}_{lm}(\theta,\phi) = \Theta(\theta)\Phi(\phi)$：球面調和関数

$\Theta(\theta) \propto Legendre$陪多項式 $\{\boxed{P_l^m(cos\theta)}\}$

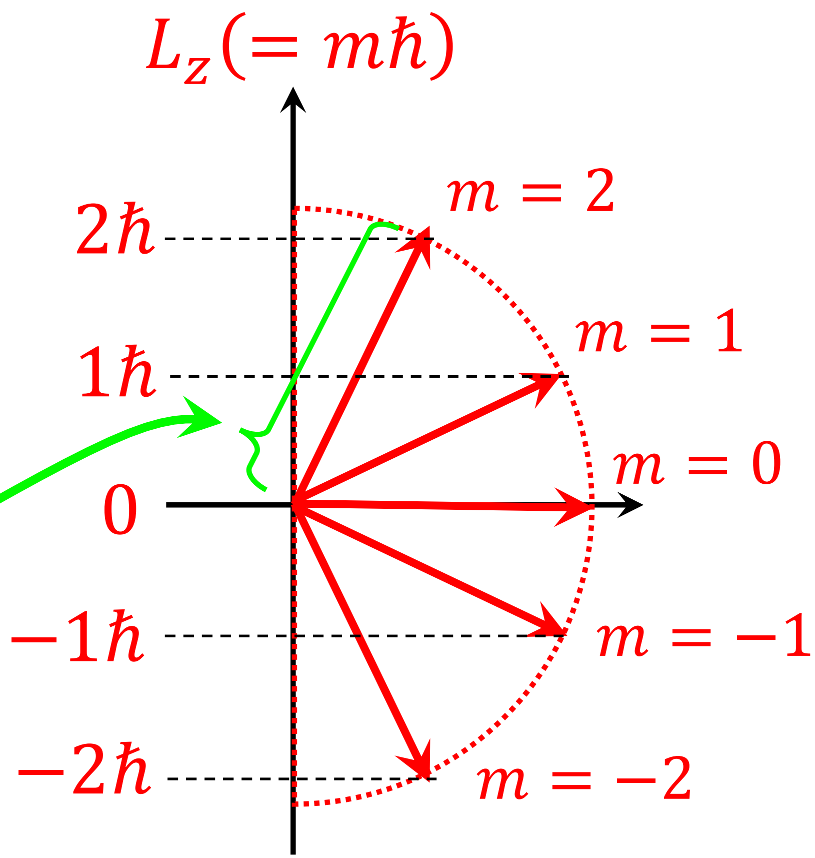
$$\frac{d}{dz}\left[(1-z^2)\frac{d\boxed{P_l^m}}{dz}\right] + \left(l(l+1) - \frac{m^2}{1-z^2}\right)\boxed{P_l^m} = 0$$

$(z = cos\theta)$

$$\Phi_m(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{-im\phi}$$

$\sqrt{l(l+1)}\hbar = \sqrt{6}\hbar$

$l = 2$の場合



長さ：$\sqrt{l(l+1)}\hbar$

z 成分：$\mathrm{m}\hbar$

軌道角運動量

交換関係

定 義

A, Bを演算子とする

$$[A, B] \equiv AB - BA$$ 交換子

$[A, B] = 0$ 可換　　$[A, B] \neq 0$ 非可換

性 質

- $[A, A] = 0$
- $[A, B] = -[B, A]$ 交代性
- $[A, B + C] = [A, B] + [A, C]$ 線形性
- $[A, BC] = ABC - BAC + BAC - BCA = [A, B]C + \mathrm{B}[A, C]$

ライプニッツ則

- $[[A, B], C] + [[B, C], A] + [[C, A], B] = 0$ ヤコビの恒等式

軌道角運動量

- 昇降演算子（角運動量）
  - ✓ 交換関係

<<角運動量演算子について>>

$$\boldsymbol{L}^2 = L_x^2 + L_x^2 + L_x^2 \qquad L_\pm = L_x \pm iL_y$$ ：昇降演算子（+が昇, −が降）

  - ✓ 角運動量

$$\boldsymbol{L} = \underline{\left(L_x, L_y, L_z\right)}$$

これらは互いに交換しない

Ex>

$$[L_x, L_y]\varphi = \left(L_xL_y - L_yL_x\right)\varphi$$

$$= -\hbar^2 \left[\underline{\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right)\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right) - \left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right)\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right)}\right]\varphi$$

$$= y\frac{\partial}{\partial x} + yz\frac{\partial^2}{\partial z\partial x} - z^2\frac{\partial^2}{\partial y\partial x} - yx\frac{\partial^2}{\partial z^2} + zx\frac{\partial^2}{\partial y\partial z} - \left(zy\frac{\partial^2}{\partial x\partial z} - z^2\frac{\partial^2}{\partial x\partial y} - xy\frac{\partial^2}{\partial z^2} + x\frac{\partial}{\partial y} + xz\frac{\partial^2}{\partial z\partial y}\right)$$

$$= y\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial y}$$

$$\therefore \underline{[L_x, L_y]}\varphi = -\hbar^2\left(y\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial y}\right)\varphi = -\hbar^2\frac{L_z}{i\hbar}\varphi = \underline{i\hbar L_z}\varphi$$

$\therefore$ $[L_x, L_y] = \left(L_xL_y - L_yL_x\right) = i\hbar L_z$ 同様に $[L_y, L_z] = i\hbar L_x$, $[L_z, L_x] = i\hbar L_y$

軌道角運動量

- ✓ これらの演算子を用いて, 次の関係が成立する

$$[\boldsymbol{L}^2, L_x] = [\boldsymbol{L}^2, L_y] = [\boldsymbol{L}^2, L_z] = 0$$

Report②：交換関係の証明

$$[L_z, L_\pm] = \pm\hbar\, L_\pm$$

$$\boldsymbol{L}^2 = L_+L_- + L_z^2 - \hbar L_z = L_-L_+ + L_z^2 + \hbar L_z$$

- 同時固有状態ついて

=定理=　A, B, Cという演算子が次の交換関係を満たしている. $[A, B] = C$

ある状態φが, Aに対してもBに対しても固有関数である場合, つまり....

$$A\varphi = a\varphi \qquad B\varphi = b\varphi$$

（a, b は固有値：定数）

であるとき, $C\varphi = 0$ でなければならない.

$$[A, B]\varphi = (AB - BA)\varphi = A(B\varphi) - B(A\varphi)$$

$$Ab\varphi - Ba\varphi = b(A\varphi) - a(B\varphi) = ba\varphi - ab\varphi = c\varphi$$

$$\therefore \quad ba\varphi - ab\varphi = c\varphi = 0 \qquad c\varphi = 0$$

$[A, B] = 0$ の場合, AとBは共通の固有関数をもつ. （同時固有状態）

Quad Erat Demonstrandum