§7 角運動量（軌道角運動量)

7.4 軌道角運動量

- **古典力学の軌道角運動量**：　$\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$　　（$\mathbf{p}$：運動量）

- **量子力学の軌道角運動量 — 演算子**：　$\hat{\mathbf{L}} = \mathbf{r} \times \hat{\mathbf{p}}$　　（$\hat{\mathbf{p}} \equiv -i\hbar\nabla$）

無次元化：　$\hat{\mathbf{l}} \equiv \dfrac{1}{\hbar}\hat{\mathbf{L}} = -i\mathbf{r} \times \dfrac{\partial}{\partial \mathbf{r}}$

$$\hat{l}_x = -i\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right), \quad \hat{l}_y = -i\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right), \quad \hat{l}_z = -i\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right). \tag{1}$$

$\hat{\mathbf{l}}$ はエルミート演算子

証明
$$\begin{aligned}
\langle\phi|\hat{l}_x\psi\rangle &= -i\int \phi^*(\mathbf{r})\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right)\psi(\mathbf{r})\,d\mathbf{r} \\
&= -i\int \phi^* y\psi\Big|_{z=-\infty}^{\infty} dxdy + i\int \phi^* z\psi\Big|_{y=-\infty}^{\infty} dxdz + i\int\left[\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right)\phi^*\right]\psi\,d\mathbf{r} \\
&= i\int\left[\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right)\phi^*\right]\psi\,d\mathbf{r} = \int\left[-i\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right)\phi\right]^*\psi\,d\mathbf{r} = \langle\hat{l}_x\phi|\psi\rangle
\end{aligned}$$

ここでは、部分積分を実行し、ϕ と ψ が無限遠で 0 となることを用いた。

- **角運動量演算子の交換関係**

任意関数 $\psi(\mathbf{r})$ に $[\hat{l}_x, \hat{l}_y]$ を作用させ、以下のように変形する。

$$\begin{aligned}
[\hat{l}_x, \hat{l}_y]\psi &= (-i)^2\left[\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right)\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right) - \left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right)\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right)\right]\psi \\
&= -\left[\left(yz\frac{\partial^2}{\partial z\partial x} + y\frac{\partial}{\partial x} - xy\frac{\partial^2}{\partial z^2} - z^2\frac{\partial^2}{\partial x\partial y} + zx\frac{\partial^2}{\partial y\partial z}\right)\right. \\
&\qquad \left. - \left(yz\frac{\partial^2}{\partial z\partial x} - z^2\frac{\partial^2}{\partial x\partial y} - xy\frac{\partial^2}{\partial z^2} + zx\frac{\partial^2}{\partial y\partial z} + x\frac{\partial}{\partial y}\right)\right]\psi \\
&= \left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right)\psi \\
&= i\hat{l}_z\psi
\end{aligned}$$

$\psi(\mathbf{r})$ は任意なので、演算子としての恒等式 $[\hat{l}_x, \hat{l}_y] = i\hat{l}_z$ が成立していることになる。他の成分に関しても同様。まとめると、以下の恒等式が成立。

$$[\hat{l}_x, \hat{l}_y] = i\hat{l}_z, \quad [\hat{l}_y, \hat{l}_z] = i\hat{l}_x, \quad [\hat{l}_z, \hat{l}_x] = i\hat{l}_y. \tag{2a}$$

従って、線型代数の定理「非可換な二つのエルミート行列を同じユニタリー行列で同時に対角化することは不可能」より、**$\hat{l}_x, \hat{l}_y, \hat{l}_z$ の同時対角化は不可能** 。
この他に、以下の等式が成立。

$$[\hat{l}^2, \hat{l}_x] = [\hat{l}^2, \hat{l}_y] = [\hat{l}^2, \hat{l}_z] = 0, \qquad \hat{l}^2 \equiv \hat{l}_x^2 + \hat{l}_y^2 + \hat{l}_z^2. \tag{2b}$$

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

従って、**$\hat{l}_z$ と $\hat{l}^2$ は同時対角化可能**。

- **演算子：$\hat{l}_\pm \equiv \hat{l}_x \pm i\hat{l}_y$**

演算子 $\hat{l}_x$ と $\hat{l}_y$ の代わりに、上式で定義される演算子 $\hat{l}_\pm$ を用いると便利である。

$\hat{l}_+$ と $\hat{l}_-$ は互いにエルミート共役、すなわち、$\hat{l}_-^\dagger = \hat{l}_+$

証明 $\langle\phi|\hat{l}_+\psi\rangle = \langle\phi|\hat{l}_x\psi\rangle + i\langle\phi|\hat{l}_y\psi\rangle = \langle\hat{l}_x\phi|\psi\rangle + i\langle\hat{l}_y\phi|\psi\rangle = \langle(\hat{l}_x - i\hat{l}_y)\phi|\psi\rangle = \langle\hat{l}_-\phi|\psi\rangle$

交換関係

$$[\hat{l}_+, \hat{l}_-] = 2\hat{l}_z, \quad [\hat{l}_z, \hat{l}_\pm] = \pm\hat{l}_\pm, \quad [\hat{l}^2, \hat{l}_\pm] = 0. \tag{3}$$

証明

$$[\hat{l}_+, \hat{l}_-] = [\hat{l}_x + i\hat{l}_y, \hat{l}_x - i\hat{l}_y] = -i[\hat{l}_x, \hat{l}_y] + i[\hat{l}_y, \hat{l}_x] = 2\hat{l}_z,$$

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

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

$\hat{l}^2$ の別表現

$$\hat{l}^2 = \hat{l}_-\hat{l}_+ + \hat{l}_z^2 + \hat{l}_z = \hat{l}_+\hat{l}_- + \hat{l}_z^2 - \hat{l}_z. \tag{4}$$

証明 $\hat{l}_\mp\hat{l}_\pm + \hat{l}_z^2 \pm \hat{l}_z = (\hat{l}_x \mp i\hat{l}_y)(\hat{l}_x \pm i\hat{l}_y) + \hat{l}_z^2 \pm \hat{l}_z = \hat{l}^2 \pm i[\hat{l}_x, \hat{l}_y] \pm \hat{l}_z = \hat{l}^2$

軌道角運動量演算子 — まとめ

$$\hat{\mathbf{l}} \equiv \frac{1}{\hbar}\hat{\mathbf{L}} \equiv -i\mathbf{r} \times \frac{\partial}{\partial\mathbf{r}}, \qquad \hat{\mathbf{l}}^\dagger = \hat{\mathbf{l}}. \tag{5a}$$

$$\hat{l}_\pm \equiv \hat{l}_x \pm i\hat{l}_y, \qquad \hat{l}_-^\dagger = \hat{l}_+. \tag{5b}$$

$$\hat{l}^2 = \hat{l}_x^2 + \hat{l}_y^2 + \hat{l}_z^2 = \hat{l}_-\hat{l}_+ + \hat{l}_z^2 + \hat{l}_z = \hat{l}_+\hat{l}_- + \hat{l}_z^2 - \hat{l}_z. \tag{5c}$$

$$[\hat{l}_x, \hat{l}_y] = i\hat{l}_z, \quad [\hat{l}_y, \hat{l}_z] = i\hat{l}_x, \quad [\hat{l}_z, \hat{l}_x] = i\hat{l}_y. \tag{6a}$$

$$[\hat{l}_+, \hat{l}_-] = 2\hat{l}_z, \quad [\hat{l}_z, \hat{l}_\pm] = \pm\hat{l}_\pm. \tag{6b}$$

$$[\hat{l}^2, \hat{l}_x] = [\hat{l}^2, \hat{l}_y] = [\hat{l}^2, \hat{l}_z] = [\hat{l}^2, \hat{l}_\pm] = 0. \tag{6c}$$

- **$\hat{l}_z$ の固有状態 $|m\rangle$**

$\hat{l}_z$ のひとつの固有値を m とし、対応する固有状態を $|m\rangle$ で表す。すなわち、

$$\hat{l}_z|m\rangle = m|m\rangle. \tag{7}$$

$|m\rangle$ の性質

(a) 演算子 $\hat{l}_z\hat{l}_\pm$ を $|m\rangle$ に作用させ、(6b) 式と (7) 式を用いる。

$$\hat{l}_z\hat{l}_\pm|m\rangle = (\hat{l}_\pm\hat{l}_z \pm \hat{l}_\pm)|m\rangle = (\hat{l}_\pm m \pm \hat{l}_\pm)|m\rangle = (m\pm 1)\hat{l}_\pm|m\rangle \tag{8a}$$

従って、**$\hat{l}_\pm|m\rangle$ は、$\hat{l}_z$ の固有値 $m\pm 1$ に属する固有関数 — $\hat{l}_\pm|m\rangle \propto |m\pm 1\rangle$**。

(b) (5c) 式と $\hat{\mathbf{l}}^\dagger = \hat{\mathbf{l}}$ を用いると、以下の不等式が証明できる。

$$m^2 = \langle m|(\hat{l}^2 - \hat{l}_x^2 - \hat{l}_y^2)|m\rangle = \langle m|\hat{l}^2|m\rangle - \left|\hat{l}_x|m\rangle\right|^2 - \left|\hat{l}_y|m\rangle\right|^2 \le \langle m|\hat{l}^2|m\rangle. \tag{8b}$$

従って、**$|m|$ の値には最大値 $m_{\max} = \ell$ が存在**。

(c) $\hat{l}_+|m\rangle \propto |m+1\rangle$ と $m_{\max} = \ell$ より、最大固有値 ℓ に属する固有関数 $|\ell\rangle$ に対しては、次式が成立しなければならない。

$$\hat{l}_+|\ell\rangle = 0. \tag{8c}$$

(d) (8c) 式の左から $\hat{l}_-$ を作用させ、(5c) 式を用いる。

$$0 = \hat{l}_-\hat{l}_+|\ell\rangle = (\hat{l}^2 - \hat{l}_z^2 - \hat{l}_z)|\ell\rangle = \hat{l}^2|\ell\rangle - \ell(\ell+1)|\ell\rangle. \tag{8d}$$

つまり、**$|\ell\rangle$ は演算子 $\hat{l}^2$ の固有状態でもあり、その固有値は $\ell(\ell+1)$**.

(e) (8d) 式の左から $\hat{l}_-^{\ell-m}$ を作用させ、$\hat{l}_-\hat{l}^2 = \hat{l}^2\hat{l}_-$ を用いる。

$$0 = \hat{l}_-^{\ell-m}\hat{l}^2|\ell\rangle - \ell(\ell+1)\hat{l}_-^{\ell-m}|\ell\rangle = \hat{l}^2\hat{l}_-^{\ell-m}|\ell\rangle - \ell(\ell+1)\hat{l}_-^{\ell-m}|\ell\rangle.$$

従って、$\hat{l}_-^{\ell-m}|\ell\rangle$ も $\hat{l}^2$ の固有状態であり、その固有値は $\ell(\ell+1)$。このことと

$$\hat{l}_-^{\ell-m}|\ell\rangle \propto |\ell-(\ell-m)\rangle = |m\rangle$$

を考慮すると、一般の m について、次式が成立することになる。

$$\hat{l}^2|m\rangle = \ell(\ell+1)|m\rangle. \tag{8e}$$

すなわち、**$|m\rangle$ は演算子 $\hat{l}^2$ の固有状態でもあり、その固有値は $\ell(\ell+1)$**.

(f) (5b), (5c), (7), および (8e) 式を用いると、次式が証明できる。

$$\left|\hat{l}_+|m\rangle\right|^2 = \langle m|\hat{l}_-\hat{l}_+|m\rangle = \langle m|(\hat{l}^2-\hat{l}_z^2-\hat{l}_z)|m\rangle = \ell(\ell+1)-m^2-m = (\ell-m)(\ell+m+1),$$

$$\left|\hat{l}_-|m\rangle\right|^2 = \langle m|\hat{l}_+\hat{l}_-|m\rangle = \langle m|(\hat{l}^2-\hat{l}_z^2+\hat{l}_z)|m\rangle = \ell(\ell+1)-m^2+m = (\ell+m)(\ell-m+1).$$

ここで、$\hat{l}_\pm|m\rangle \propto |m\pm 1\rangle$ を考慮すると、$\hat{l}_\pm|m\rangle$ が、次のように書けることがわかる。

$$\hat{l}_\pm|m\rangle = \sqrt{(\ell\mp m)(\ell\pm m+1)}|m\pm 1\rangle. \tag{8f}$$

(g) (8b) 式と (8d) 式より、$|m| \le \sqrt{\ell(\ell+1)}$。また、$\hat{l}_-|m\rangle \propto |m-1\rangle$ より、条件

$$|m_{\rm min}| \le \sqrt{\ell(\ell+1)}$$

を満たす最小の $m = m_{\rm min}$ について、$\hat{l}_-|m_{\rm min}\rangle = 0$, すなわち

$$(\ell + m_{\rm min})(\ell - m_{\rm min} + 1) = 0$$

が成立する必要がある。従って、

$$m_{\rm min} = -\ell. \tag{8g}$$

(h) 状態 $|m_{\rm min}\rangle = |-\ell\rangle$ は、$|\ell\rangle$ に $\hat{l}_-$ を繰り返し作用させることにより得られるので、$\ell - m_{\rm min} = 2\ell$ は非負整数でなければならない。従って、ℓ の取り得る値は次の値に限られる。

$$\ell = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \cdots \tag{8h}$$

以下、$|m\rangle$ が $\hat{l}^2$ の固有状態でもあることを考慮して、$|m\rangle \longrightarrow |\ell m\rangle$ と書くことにする。

基底関数 $|\ell m\rangle$ の性質 — まとめ

$$\hat{l}^2|\ell m\rangle = \ell(\ell+1)|\ell m\rangle, \qquad \ell = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \cdots. \tag{9a}$$

$$\hat{l}_z|\ell m\rangle = m|\ell m\rangle, \qquad m = -\ell, -\ell+1, \cdots, \ell-1, \ell. \tag{9b}$$

$$\hat{l}_\pm|m\rangle = \sqrt{(\ell \mp m)(\ell \pm m + 1)}|m \pm 1\rangle. \tag{9c}$$

- **演算子 $\hat{\rm l}$ の極座標表示**

極座標

$$\begin{array}{c}(x,y,z) = (r\sin\theta\cos\varphi, r\sin\theta\sin\varphi, r\cos\theta) \\ (0 \le r < \infty,\ \ 0 \le \theta \le \pi,\ \ 0 \le \varphi < 2\pi)\end{array} \quad \longleftrightarrow \quad \left\{\begin{array}{l} r = \sqrt{x^2+y^2+z^2} \\ \tan\theta = \sqrt{x^2+y^2}/z \\ \tan\varphi = y/x \end{array}\right. . \tag{10}$$

変数変換

$$\frac{\partial r}{\partial x} = \frac{x}{\sqrt{x^2+y^2+z^2}} = \frac{x}{r} = \sin\theta\cos\varphi, \quad \frac{\partial r}{\partial y} = \frac{y}{r} = \sin\theta\sin\varphi, \quad \frac{\partial r}{\partial z} = \frac{z}{r} = \cos\theta,$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial x} = \frac{x\cos^2\theta}{z\sqrt{x^2+y^2}} = \frac{\cos\theta\cos\varphi}{r}, \quad \frac{\partial \theta}{\partial y} = \frac{\cos\theta\sin\varphi}{r}, \quad \frac{\partial \theta}{\partial z} = -\frac{\sqrt{x^2+y^2}\cos^2\theta}{z^2} = -\frac{\sin\theta}{r},$$

$$\frac{\partial \varphi}{\partial x} = -\frac{y\cos^2\varphi}{x^2} = -\frac{\sin\varphi}{r\sin\theta}, \quad \frac{\partial \varphi}{\partial y} = \frac{\cos^2\varphi}{x} = \frac{\cos\varphi}{r\sin\theta}, \quad \frac{\partial \varphi}{\partial z} = 0.$$

従って

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial x} &= \frac{\partial r}{\partial x}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial \theta}{\partial x}\frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\partial \varphi}{\partial x}\frac{\partial}{\partial \varphi} = \sin\theta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos\theta\cos\varphi}{r}\frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{\sin\varphi}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial \varphi},\\
\frac{\partial}{\partial y} &= \frac{\partial r}{\partial y}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial \theta}{\partial y}\frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\partial \varphi}{\partial y}\frac{\partial}{\partial \varphi} = \sin\theta\sin\varphi\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos\theta\sin\varphi}{r}\frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\cos\varphi}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial \varphi},\\
\frac{\partial}{\partial z} &= \frac{\partial r}{\partial z}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial \theta}{\partial z}\frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\partial \varphi}{\partial z}\frac{\partial}{\partial \varphi} = \cos\theta\frac{\partial}{\partial r} - \frac{\sin\theta}{r}\frac{\partial}{\partial \theta}.
\end{aligned}
$$

$\hat{\mathrm{l}}$ の極座標表示

$$
\begin{aligned}
\hat{l}_z &= -i\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right)\\
&= -i\left[r\sin\theta\cos\varphi\left(\sin\theta\sin\varphi\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos\theta\sin\varphi}{r}\frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\cos\varphi}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial \varphi}\right)\right.\\
&\qquad \left. -r\sin\theta\sin\varphi\left(\sin\theta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos\theta\cos\varphi}{r}\frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{\sin\varphi}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial \varphi}\right)\right]\\
&= -i\frac{\partial}{\partial \varphi},
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
\hat{l}_x &= -i\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right)\\
&= -i\left[r\sin\theta\sin\varphi\left(\cos\theta\frac{\partial}{\partial r} - \frac{\sin\theta}{r}\frac{\partial}{\partial \theta}\right)\right.\\
&\qquad \left. -r\cos\theta\left(\sin\theta\sin\varphi\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos\theta\sin\varphi}{r}\frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\cos\varphi}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial \varphi}\right)\right]\\
&= i\left(\sin\varphi\frac{\partial}{\partial \theta} + \cot\theta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial \varphi}\right),
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
\hat{l}_y &= -i\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right)\\
&= -i\left[r\cos\theta\left(\sin\theta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos\theta\cos\varphi}{r}\frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{\sin\varphi}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial \varphi}\right)\right.\\
&\qquad \left. -r\sin\theta\cos\varphi\left(\cos\theta\frac{\partial}{\partial r} - \frac{\sin\theta}{r}\frac{\partial}{\partial \theta}\right)\right]\\
&= i\left(-\cos\varphi\frac{\partial}{\partial \theta} + \cot\theta\sin\varphi\frac{\partial}{\partial \varphi}\right).
\end{aligned}
$$

$\hat{l}_\pm = \hat{l}_x \pm i\hat{l}_y$ の極座標表示

$$
\hat{l}_\pm = \pm \mathrm{e}^{\pm i\varphi}\frac{\partial}{\partial \theta} + i\mathrm{e}^{\pm i\varphi}\cot\theta\frac{\partial}{\partial \varphi} = \mathrm{e}^{\pm i\varphi}\left(\pm\frac{\partial}{\partial \theta} + i\cot\theta\frac{\partial}{\partial \varphi}\right).
$$

$\hat{l}^2 = \hat{l}_x^2 + \hat{l}_y^2 + \hat{l}_z^2$ の極座標表示

$$
\begin{aligned}
\hat{l}^2 &= -\left(\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} + \cot\theta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)\left(\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} + \cot\theta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) \\
&\quad -\left(-\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} + \cot\theta\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)\left(-\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} + \cot\theta\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) - \frac{\partial}{\partial\varphi}\frac{\partial}{\partial\varphi} \\
&= -\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \cot\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\left(-\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\sin\varphi + \sin\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\cos\varphi\right) \\
&\quad + \cot^2\theta\left(-\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi} - \sin\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) - \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} \\
&= -\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} - \cot\theta\frac{\partial}{\partial\theta} - (\cot^2\theta + 1)\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} \\
&= -\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta} - \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}.
\end{aligned}
$$

軌道角運動量演算子の極座標表示 — まとめ

$$
\hat{l}_z = -i\frac{\partial}{\partial\varphi}, \qquad \hat{l}_\pm = \mathrm{e}^{\pm i\varphi}\left(\pm\frac{\partial}{\partial\theta} + i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right). \tag{11a}
$$

$$
\hat{l}^2 = -\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta} - \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}. \tag{11b}
$$

- **極座標表示における $|\ell m\rangle$ の表現 — $Y_{\ell m}(\theta,\varphi) \equiv \langle\theta\varphi|\ell m\rangle$**

(a) **φ 依存性**

演算子 $\hat{l}_z$ は θ に依存せず $\longrightarrow$ $\hat{l}_z$ の固有関数：$\Phi_m(\varphi) = \langle\varphi|m\rangle$ — φ のみの関数

$\Phi_m(\varphi)$ が満たす微分方程式 — (9b) 式と (11a) 式より

$$
-i\frac{d\Phi_m}{d\varphi} = m\Phi_m \quad\longrightarrow\quad \frac{d\Phi_m}{\Phi_m} = im\,d\varphi \quad\longrightarrow\quad \Phi_m(\varphi) = A\,\mathrm{e}^{im\varphi} \quad (A：規格化定数).
$$

波動関数の一価性の要請 $\longrightarrow$ m は整数 $\longrightarrow$ ℓ(m の最大値) は非負整数

規格化

$$
1 = \int_0^{2\pi}|\Phi_m(\varphi)|^2 d\varphi = |A|^2 \quad\longrightarrow\quad \Phi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\mathrm{e}^{im\varphi}. \tag{12}
$$

直交性 $\longleftarrow$ エルミート演算子 $\hat{l}_z$ の異なる固有値に属する固有関数の直交性

$$
\langle\Phi_m|\Phi_{m'}\rangle \equiv \int_0^{2\pi}\Phi_m^*(\varphi)\Phi_{m'}(\varphi)d\varphi = \delta_{mm'}. \tag{13}
$$

(b) **θ 依存性**

固有関数 $Y_{\ell m}(\theta,\varphi)$ を次の形に置く。

$$Y_{\ell m}(\theta,\varphi)=\Theta_{\ell m}(\theta)\Phi_m(\varphi). \tag{14}$$

$\Theta_{\ell m}(\theta)$ が満たす方程式 — (9c), (11a) および (12) 式より

$$\left(\pm\frac{d}{d\theta}-m\cot\theta\right)\Theta_{\ell m}(\theta)=\sqrt{(\ell\mp m)(\ell\pm m+1)}\Theta_{\ell,m\pm 1}(\theta). \tag{15}$$

(b1) **$\Theta_{\ell\ell}$ の表式**

$m=\pm\ell$ に対する方程式

$$\pm\left(\frac{d}{d\theta}-\ell\frac{\cos\theta}{\sin\theta}\right)\Theta_{\ell,\pm\ell}=0 \quad\longrightarrow\quad \frac{d\Theta_{\ell\ell}}{\Theta_{\ell\ell}}=\ell\frac{\cos\theta}{\sin\theta}d\theta \quad\longleftrightarrow\quad d\ln\Theta_{\ell\ell}=d\ln\sin^\ell\theta.$$

この方程式を解いて、

$$\Theta_{\ell\ell}(\theta)=A_\ell\sin^\ell\theta \qquad (A_\ell\text{：規格化定数}).$$

規格化

$$\begin{aligned}
1&=\int_0^\pi|\Theta_{\ell\ell}(\theta)|^2\sin\theta d\theta=|A_\ell|^2\int_0^\pi\sin^{2\ell}\theta\sin\theta d\theta=|A_\ell|^2\int_0^\pi\sin^{2\ell}\theta d(-\cos\theta)\\
&=|A_\ell|^2\int_{-1}^1(1-z^2)^\ell dz \qquad (z\equiv\cos\theta)\\
&=\frac{|A_\ell|^2}{\ell+1}\left[(1-z)^\ell(1+z)^{\ell+1}\Big|_{-1}^1+\ell\int_{-1}^1(1-z)^{\ell-1}(1+z)^{\ell+1}dz\right]\\
&=\frac{|A_\ell|^2\ell}{\ell+1}\int_{-1}^1(1-z)^{\ell-1}(1+z)^{\ell+1}dz\\
&=\frac{|A_\ell|^2\ell(\ell-1)}{(\ell+1)(\ell+2)}\int_{-1}^1(1-z)^{\ell-2}(1+z)^{\ell+2}dz\\
&=\frac{|A_\ell|^2\ell!}{(\ell+1)(\ell+2)\cdots(2\ell)}\int_{-1}^1(1+z)^{2\ell}dz\\
&=\frac{|A_\ell|^2(\ell!)^2}{(2\ell+1)!}(1+z)^{2\ell+1}\Big|_{-1}^1\\
&=\frac{|A_\ell|^2(\ell!)^2 2^{2\ell+1}}{(2\ell+1)!} \qquad\longrightarrow\qquad A_\ell=\frac{(-1)^\ell}{2^\ell\ell!}\sqrt{\frac{(2\ell+1)!}{2}}.
\end{aligned}$$

ここで、$(-1)^\ell$ は便宜上の位相因子。従って、$\Theta_{\ell\ell}$ として次式を得る。

$$\Theta_{\ell\ell}(\theta)=A_\ell\sin^\ell\theta, \qquad A_\ell=\frac{(-1)^\ell}{2^\ell\ell!}\sqrt{\frac{(2\ell+1)!}{2}}. \tag{16}$$

(b2) **$\Theta_{\ell m}$ の表式**

次に、一般の m $(\leq \ell)$ に対する $\Theta_{\ell m}$ を、(15) 式を用いて、以下のように求める。

$$\begin{aligned}
\Theta_{\ell,m-1} &= \frac{1}{\sqrt{(\ell-m+1)(\ell+m)}}\left(-\frac{d}{d\theta}-m\cot\theta\right)\Theta_{\ell m} \\
&= \frac{1}{\sqrt{(\ell-m+1)(\ell+m)}}\frac{-1}{\sin^m\theta}\frac{d}{d\theta}\sin^m\theta\,\Theta_{\ell m} \\
&= \frac{1}{\sqrt{(\ell-m+1)(\ell+m)}}\frac{-1}{\sin^m\theta}\frac{d(\cos\theta)}{d\theta}\frac{d}{d(\cos\theta)}\sin^m\theta\,\Theta_{\ell m} \\
&= \frac{1}{\sqrt{(\ell-m+1)(\ell+m)}}\frac{1}{\sin^{m-1}\theta}\frac{d}{d(\cos\theta)}\sin^m\theta\,\Theta_{\ell m}.
\end{aligned}$$

$m=\ell$

$$\Theta_{\ell,\ell-1} = \frac{1}{\sqrt{2\ell}}\frac{1}{\sin^{\ell-1}\theta}\frac{d}{d(\cos\theta)}\sin^\ell\theta\,\Theta_{\ell\ell} = \frac{A_\ell}{\sqrt{2\ell}}\frac{1}{\sin^{\ell-1}\theta}\frac{d}{d(\cos\theta)}\sin^{2\ell}\theta.$$

$m=\ell-1$

$$\begin{aligned}
\Theta_{\ell,\ell-2} &= \frac{1}{\sqrt{2(2\ell-1)}}\frac{1}{\sin^{\ell-2}\theta}\frac{d}{d(\cos\theta)}\sin^{\ell-1}\theta\,\Theta_{\ell,\ell-1} \\
&= \frac{A_\ell}{\sqrt{2(2\ell)(2\ell-1)}}\frac{1}{\sin^{\ell-2}\theta}\frac{d^2}{d(\cos\theta)^2}\sin^{2\ell}\theta.
\end{aligned}$$

$m=\ell-2$

$$\Theta_{\ell,\ell-3} = \frac{A_\ell}{\sqrt{3\cdot 2(2\ell)(2\ell-1)(2\ell-2)}}\frac{1}{\sin^{\ell-3}\theta}\frac{d^3}{d(\cos\theta)^3}\sin^{2\ell}\theta.$$

一般の m — (16) 式の A_ℓ を用いて

$$\begin{aligned}
\Theta_{\ell m} &= A_\ell\sqrt{\frac{(\ell+m)!}{(\ell-m)!(2\ell)!}}\frac{1}{\sin^m\theta}\frac{d^{\ell-m}}{d(\cos\theta)^{\ell-m}}\sin^{2\ell}\theta \\
&= \frac{(-1)^\ell}{2^\ell\ell!}\sqrt{\frac{(2\ell+1)(\ell+m)!}{2(\ell-m)!}}\frac{1}{(1-z^2)^{m/2}}\frac{d^{\ell-m}}{dz^{\ell-m}}(1-z^2)^\ell\bigg|_{z=\cos\theta}.
\end{aligned} \tag{17}$$

(c) **直交性 $\longleftarrow$ エルミート演算子 $\hat{l}^2$ の異なる固有値に属する固有関数の直交性**

$$\langle\Theta_{\ell m}|\Theta_{\ell' m}\rangle \equiv \int_0^\pi \Theta^*_{\ell m}(\theta)\Theta_{\ell' m}(\theta)\sin\theta d\theta = \delta_{\ell\ell'}. \tag{18}$$

(12) 式と (17) 式を (14) 式に代入して、球面調和関数 $Y_{\ell m}$ が次のように得られる。

$$Y_{\ell m}(\theta,\varphi) = \frac{(-1)^\ell}{2^\ell\ell!}\sqrt{\frac{(2\ell+1)(\ell+m)!}{4\pi(\ell-m)!}}\frac{1}{(1-z^2)^{m/2}}\frac{d^{\ell-m}}{dz^{\ell-m}}(1-z^2)^\ell\bigg|_{z=\cos\theta}\mathrm{e}^{im\varphi}. \tag{19}$$

極座標表示における $|\ell m\rangle$ の表現：$Y_{\ell m}(\theta,\varphi) \equiv \langle\theta\varphi|\ell m\rangle$ — まとめ

$$Y_{\ell m}(\theta,\varphi) = \frac{(-1)^\ell}{2^\ell \ell!}\sqrt{\frac{(2\ell+1)(\ell+m)!}{4\pi(\ell-m)!}}\,\frac{1}{(1-z^2)^{m/2}}\frac{d^{\ell-m}}{dz^{\ell-m}}(1-z^2)^\ell\bigg|_{z=\cos\theta} \mathrm{e}^{im\varphi}. \tag{20a}$$

ℓ と m の取り得る値 $\longleftarrow$ 波動関数の一価性

$$\ell = 0, 1, 2, \cdots, \qquad m = 0, \pm 1, \cdots, \pm\ell. \tag{20b}$$

規格直交性 — (13) 式と (18) 式より

$$\langle Y_{\ell m}|Y_{\ell' m'}\rangle \equiv \int_0^\pi d\theta\sin\theta\int_0^{2\pi} d\varphi\, Y^*_{\ell m}(\theta,\varphi)Y_{\ell' m'}(\theta,\varphi) = \delta_{\ell\ell'}\delta_{mm'}. \tag{20c}$$

$\ell \le 2$ の $Y_{\ell m}$

$$Y_{00}(\theta,\varphi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}, \tag{21a}$$

$$Y_{1\pm 1}(\theta,\varphi) = \mp\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta\mathrm{e}^{\pm i\varphi}, \quad Y_{10}(\theta,\varphi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta, \tag{21b}$$

$$Y_{2\pm 2}(\theta,\varphi) = \frac{1}{4}\sqrt{\frac{15}{2\pi}}\sin^2\theta\mathrm{e}^{\pm 2i\varphi}, \quad Y_{2\pm 1}(\theta,\varphi) = \mp\frac{1}{2}\sqrt{\frac{15}{2\pi}}\sin\theta\cos\theta\mathrm{e}^{\pm i\varphi},$$
$$Y_{20}(\theta,\varphi) = \frac{1}{4}\sqrt{\frac{5}{\pi}}(3\cos^2\theta - 1). \tag{21c}$$