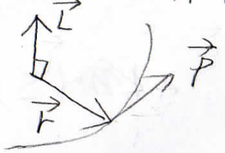
水素原子 Part 2

☆角運動量

角運動量保存則

外力(トルク)を与えられない限り、角運動量は一定

ベクトル
(方向も保存)



自転車のジャイロ効果

$$\vec{L} = \vec{r}\times\vec{p}$$

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

$$\hat{r} = \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix},\ \hat{p} = \begin{pmatrix} i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \\ i\hbar \frac{\partial}{\partial y} \\ i\hbar \frac{\partial}{\partial z} \end{pmatrix}$$

$$\hat{L}_x = i\hbar\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right)$$
$$\hat{L}_y = i\hbar\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right)$$
$$\hat{L}_z = i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right)$$

$$\hat{L}_x = i\hbar\left(\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{\cos\varphi}{\tan\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)$$
$$\hat{L}_y = i\hbar\left(-\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{\sin\varphi}{\tan\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)$$
$$\hat{L}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}$$

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2\left\{\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right\}$$

$$\underbrace{-\hbar^2\frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d\Theta}{d\theta}\right) + \frac{\nu}{\sin^2\theta}\Theta}_{\frac{\hat{L}^2Y}{\Phi}} - \Lambda\Theta = 0$$

$m = \frac{\sqrt{\nu}}{\hbar}$, $\Lambda = \hbar^2\lambda$, $t = \cos\theta$ とおく

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

$dt = -\sin\theta\, d\theta$ より

$$\frac{d}{dt}\left\{(1-t^2)\frac{d\Theta}{dt}\right\} + \left(\lambda - \frac{m^2}{1-t^2}\right)\Theta = 0$$

Θ が t のべき級数で表せると仮定する

$$\Theta = t^l + C_{l-1}t^{l-1} + C_{l-2}t^{l-2} + \cdots \ (C:定数)$$

・$m = 0$ のとき

$$\frac{d}{dt}\left\{(1-t^2)\frac{d\Theta}{dt}\right\} + \lambda\Theta = 0$$

最高次数(t^l)の係数も0になるはず

$$-l(l+1) + \lambda = 0$$
$$\lambda = l(l+1)$$

これを満たすΘの条件

$$\Theta \propto P_l(t) = \frac{1}{2^l l!}\frac{d^l}{dt^l}(t^2-1)^l$$

ルジャンドルの多項式

・$m \neq 0$ のとき

$\Theta \propto (1-t^2)^\alpha$ とおく

$$\frac{d}{dt}\left\{(1-t^2)\frac{d\Theta}{dt}\right\} + \left(\lambda - \frac{m^2}{1-t^2}\right)\Theta = 0$$

$(1-t^2)^{\alpha-1}$ の係数 $4\alpha^2 t - m^2 = 0$

$t \approx 1$ のとき $4\alpha^2 - m^2 = 0$

$\alpha = \frac{|m|}{2}$ としたとき

$\Theta = (1-t^2)^{\frac{|m|}{2}} f(t)$

$f(t) = t^k + C_{k-1} t^{k-1} + C_{k-2} t^{k-2} + \cdots$

$\left\{\frac{d}{d\theta}(1-t^2)\frac{d\Theta}{d\theta}\right\} + \left(\lambda - \frac{m^2}{1-t^2}\right)\Theta = 0$

最高次数 ($t^{|m|+k}$) の係数

$|m| + |m|(k+1) + (|m|+2)k + k(k-1) - \lambda = 0$

$\lambda = l(l+1)$

$= |m|^2 + (2k+1)|m| + k(k+1)$

$= (|m|+k)(|m|+k+1)$

$l = |m| + k$, $k = 0, 1, 2, \cdots$ より $|m| \leq l$

$l = 0, 1, 2, \cdots$ 角運動量量子数(方位量子数)

$\Theta \propto (1-t^2)^{\frac{|m|}{2}} \underbrace{\frac{d^m}{dt^m} P_l(t)}_{f(t) = t^k + C_{k-1}t^{k-1} + \cdots}$

規格化条件

$Y = \Theta \Phi$

$dx\,dy\,dz = \underbrace{r^2 \sin\theta}_{\text{ヤコビアン}}\, dr\, d\theta\, d\varphi$

$\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi} Y^* Y \sin\theta \, d\theta\, d\varphi = 1$

$Y_{l,m}$ と表すとき

$Y_{0,0} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$

$Y_{1,0} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos\theta$

$Y_{1,\pm 1} = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin\theta\, e^{\pm i\varphi}$

練習問題

$l = 0$ のとき、Y の角度依存性は?

答え

$|m| \leq l$ より $l = 0 \Rightarrow m = 0$

$\Theta \propto \underbrace{(1-t^2)^{\frac{|m|}{2}}}_{1} \underbrace{\frac{d^m}{dt^m}}_{1}\left[\underbrace{\frac{1}{2^l l!}}_{1} \underbrace{\frac{d^l}{dt^l}}_{1}\underbrace{\left\{(t^2-1)^l\right\}}_{1}\right]$

$= 1$

Θ は $t(\theta)$ に依存しない

$\Phi \propto e^{im\varphi} \to 1$

Φ は φ に依存しない

よって $l = 0$ のとき Y は角度依存しない

つまり ψ は r だけで決まる(球状)