

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

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

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

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

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

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

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

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2 \left\{ (z^2 + y^2) \frac{\partial^2}{\partial x^2} + (x^2 + z^2) \frac{\partial^2}{\partial y^2} + (y^2 + x^2) \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right\}$$

極座標に変換すると.

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

$$-\hbar^2 \frac{1}{\sin\theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin\theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) + \frac{\nu}{\sin^2\theta} \Theta - \Lambda \Theta = 0$$

$$\frac{\hat{L}^2 \Psi}{\Psi}$$

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

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

$$dt = -\sin\theta d\theta \text{ (より)}$$

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

Θがtのべき級数で表せると仮定する

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

• 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 ≠ 0 のとき

$$\Theta \propto (1-t^2)^\alpha \text{ とおく}$$

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

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

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

$$\alpha = \frac{|m|}{2} \text{ と } t = z^{\pm}$$

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

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

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

最高次数 $(t^{|m|+k})$ の係数

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

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

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

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

$$l = |m| + k, \quad k = 0, 1, 2, \dots \text{ より } |m| \leq l$$

$l = 0, 1, 2, \dots$ 角運動量量子数 (方位量子数)

$$\Theta \propto (1-t^2)^{\frac{|m|}{2}} \frac{d^{|m|}}{dt^{|m|}} P_l(t)$$

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

規格化条件

$$Y = \Theta \Phi$$

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

$Y_{l,m}$ と表すとき

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

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

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

$$dx dy dz = r^2 \sin\theta dr d\theta d\varphi$$

ヤコビアン

練習問題

$l=0$ のとき、 Y の角度依存性は?

答え

$$|m| \leq l \text{ より } l=0 \Rightarrow m=0$$

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

$\downarrow \quad \downarrow \quad \downarrow \quad \downarrow \quad \downarrow$
 $1 \quad 1 \quad 1 \quad 1 \quad 1$

$$= 1$$

Θ は $t(\theta)$ に依存しない

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

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 Y はただ一つ決まる (球状)