

軌道角運動量：対称性と保存量

軌道角運動量の保存

中心力場（一定点と質点を結ぶ方向に働く力を中心力と呼ぶ。）の中にある質点を考えよう。座標の原点を力の中心にとり、質点の位置を r とすると力のベクトルは $f(r)r/r$ と書かれる。質点の質量を m とするとニュートンの運動方程式は

$$m\ddot{\mathbf{r}} = f(r)\frac{\mathbf{r}}{r} \quad (1)$$

である。ここで変数の上についた点・は時間微分 d/dt をあらわす。(1)を用いるとベクトル積 $\mathbf{r} \times \dot{\mathbf{r}}$ の時間微分は

$$\frac{d}{dt}(\mathbf{r} \times \dot{\mathbf{r}}) = (\dot{\mathbf{r}} \times \dot{\mathbf{r}}) + (\mathbf{r} \times \ddot{\mathbf{r}}) = \frac{f(r)}{m} \frac{(\mathbf{r} \times \mathbf{r})}{r} = 0$$

となるから、 $\mathbf{r} \times \dot{\mathbf{r}}$ は時間によらず運動の間一定に保たれる。ここで考えたベクトル

$$\vec{\ell} = \mathbf{r} \times m\dot{\mathbf{r}} = \mathbf{r} \times \mathbf{p} \quad (2)$$

は古典力学で学んだ角運動量（軌道角運動量）である。（ $\mathbf{p} = m\dot{\mathbf{r}}$ は運動量。）したがって、中心力場の中で運動している質点については角運動量が一定に保たれることを、上の式は示している。 $\vec{\ell}$ の方向が一定ということは、運動する質点の位置ベクトル \mathbf{r} は常に $\vec{\ell}$ に垂直な平面内にあることである。 $\vec{\ell}$ の大きさが一定ということの意味は次のようにすれば理解できる。 $\vec{\ell}$ の方向を z 軸にとり、2次元極座標を用いると

$$x = r \cos \phi, \quad y = r \sin \phi$$

である。 $\ell_z = xp_y - yp_x$ にたいして古典の関係式

$$p_x = m\dot{r} \cos \phi - mr \sin \phi \dot{\phi}, \quad p_y = m\dot{r} \sin \phi + mr \cos \phi \dot{\phi}$$

を用いると

$$l_z = mr^2 \frac{d\phi}{dt}$$

である事が導かれる。したがって $l = \text{一定}$ (今の場合は $l_z = \text{一定}$) とは面積速度 $r^2 \frac{d\phi}{dt}$ が時間によらず一定であることを意味しているのである。ここで「軌道」角運動量というように特に軌道運動を強調しているのは、後であられる純粋に量子力学的な起源をもった「スピン」角運動量と区別するためである。

質点系が互いに作用を及ぼしあって運動し、質点間に働く力のベクトルが質点同士を結んだベクトル $\mathbf{r}_{ik} = \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_k$ と平行である場合にも、全角運動量は一定に保たれる。全角運動量 \mathbf{L} は、それぞれの質点を示す添え字 i をつけて、各質点の角運動量の和

$$\mathbf{L} = \sum_i \mathbf{r}_i \times m \dot{\mathbf{r}}_i = \sum_i \mathbf{r}_i \times \mathbf{p}_i \quad (3)$$

と定義される。(3) 式を時間で微分すると

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \mathbf{L} &= \sum_i m \{ (\dot{\mathbf{r}}_i \times \dot{\mathbf{r}}_i) + (\mathbf{r}_i \times \ddot{\mathbf{r}}_i) \} = \sum_i (\mathbf{r}_i \times \sum_k \mathbf{F}_{ik}) \\ &= \sum_{i>k} (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_k) \times \mathbf{F}_{ik} = 0 \end{aligned} \quad (4)$$

であるから、この場合にも全角運動量は保存する。 \mathbf{F}_{ik} は質点 k より質点 i に働く力で、運動方程式は

$$m \ddot{\mathbf{r}}_i = \sum_k \mathbf{F}_{ik}$$

であり、作用・反作用の法則 $\mathbf{F}_{ik} = -\mathbf{F}_{ki}$ 、および $\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_k$ と \mathbf{F}_{ik} が平行であることを用いた。

このように、古典力学では、中心力場中の質点の運動、あるいは互いをむすんだ位置ベクトルの方向に力を及ぼしあう質点系では、「角運動量保存」の法則が成り立っている。量子力学的系ではどうであろう。

量子力学的な軌道角運動量演算子

軌道角運動量は (2) で定義されているのだから、量子力学に移るには

(2) の運動量を演算子で書き直して

$$\begin{aligned}\hat{\ell} = \mathbf{r} \times \hat{\mathbf{p}} &= \frac{\hbar}{i} \mathbf{r} \times \nabla = \frac{\hbar}{i} \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y}, z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z}, x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) \\ &= (\hat{\ell}_x, \hat{\ell}_y, \hat{\ell}_z)\end{aligned}\quad (5)$$

と定義すればよいだろう。この $\hat{\ell}_x$ を r の関数 $f(r)$ に作用させてみよう。

$$\frac{\partial f(r)}{\partial x} = \frac{df(r)}{dr} \cdot \frac{\partial r}{\partial x} = \frac{x}{r} \cdot \frac{df(r)}{dr}$$

であるから

$$\hat{\ell}_x f(r) = -i\hbar \left(y \frac{\partial f(r)}{\partial z} - z \frac{\partial f(r)}{\partial y} \right) + f(r) \hat{\ell}_x = f(r) \hat{\ell}_x \quad (6a)$$

である。同様にして

$$\hat{\ell}_y f(r) = f(r) \hat{\ell}_y, \quad \hat{\ell}_z f(r) = f(r) \hat{\ell}_z \quad (6b)$$

も導かれる。このことは、後の (16) で見るように、極座標表示 (r, θ, ϕ) に移った時に $\hat{\ell}_x$ 等が動径成分 r の微分 $\partial/\partial r$ を含まないことを意味している。

軌道角運動量演算子とラプラシアン $\Delta = \nabla \cdot \nabla$ の間には密接な関係があることを見ることにしよう。 $\hat{\ell}_x^2 + \hat{\ell}_y^2 + \hat{\ell}_z^2$ をあからさまな形で書き下してみよう。

$$\begin{aligned}\hat{\ell}_x^2 &= \left(\frac{\hbar}{i} \right)^2 \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) \\ &= -\hbar^2 \left(y^2 \frac{\partial^2}{\partial z^2} + z^2 \frac{\partial^2}{\partial y^2} - 2yz \frac{\partial^2}{\partial y \partial z} - y \frac{\partial}{\partial y} - z \frac{\partial}{\partial z} \right)\end{aligned}$$

であるから

$$\begin{aligned}& (\hat{\ell}_x^2 + \hat{\ell}_y^2 + \hat{\ell}_z^2) / \hbar^2 \\ &= - \left(y^2 \frac{\partial^2}{\partial z^2} + z^2 \frac{\partial^2}{\partial y^2} + z^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} + x^2 \frac{\partial^2}{\partial z^2} + x^2 \frac{\partial^2}{\partial y^2} + y^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) \\ & \quad + 2 \left(yz \frac{\partial^2}{\partial y \partial z} + zx \frac{\partial^2}{\partial z \partial x} + xy \frac{\partial^2}{\partial x \partial y} \right) + 2 \left(y \frac{\partial}{\partial y} + z \frac{\partial}{\partial z} + x \frac{\partial}{\partial x} \right)\end{aligned}\quad (7a)$$

となる。一方

$$\begin{aligned}
 r^2 \Delta &= (x^2 + y^2 + z^2) \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \\
 &= \left(x^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} + y^2 \frac{\partial^2}{\partial y^2} + z^2 \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \\
 &\quad + \left(y^2 \frac{\partial^2}{\partial z^2} + z^2 \frac{\partial^2}{\partial y^2} + z^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} + x^2 \frac{\partial^2}{\partial z^2} + x^2 \frac{\partial^2}{\partial y^2} + y^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right),
 \end{aligned} \tag{7b}$$

$$\begin{aligned}
 (\mathbf{r} \cdot \nabla)^2 &= \left(x \frac{\partial}{\partial x} + y \frac{\partial}{\partial y} + z \frac{\partial}{\partial z} \right)^2 \\
 &= 2 \left(xy \frac{\partial^2}{\partial x \partial y} + yz \frac{\partial^2}{\partial y \partial z} + zx \frac{\partial^2}{\partial z \partial x} \right) \\
 &\quad + \left(x^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} + y^2 \frac{\partial^2}{\partial y^2} + z^2 \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + \left(x \frac{\partial}{\partial x} + y \frac{\partial}{\partial y} + z \frac{\partial}{\partial z} \right)
 \end{aligned} \tag{7c}$$

である。(7a ~ c) をまとめると

$$\hat{\ell}^2 / \hbar^2 = -r^2 \Delta + (\mathbf{r} \cdot \nabla)^2 + (\mathbf{r} \cdot \nabla) \tag{8}$$

が恒等的に成立していることが分かる。あるいは書き直せば、ラプラシアンは

$$\Delta = \frac{1}{r^2} [(\mathbf{r} \cdot \nabla)^2 + (\mathbf{r} \cdot \nabla)] - \frac{1}{r^2 \hbar^2} \hat{\ell}^2 \tag{9}$$

である。さらに $(\mathbf{r} \cdot \nabla)$ を極座標 ((15) および図 6.1 参照) であらわせば

$$\mathbf{r} \cdot \nabla = x \frac{\partial}{\partial x} + y \frac{\partial}{\partial y} + z \frac{\partial}{\partial z} = r \frac{\partial}{\partial r}$$

であるから

$$\Delta = \frac{1}{r^2} \left(r \frac{\partial}{\partial r} \right)^2 + \frac{1}{r} \left(\frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{1}{r^2 \hbar^2} \hat{\ell}^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{1}{r^2 \hbar^2} \hat{\ell}^2 \tag{9'}$$

と書くこともできる。 $\hat{\ell}$ は (6a ~ b) で示した様に動径成分 r の微分を含まない。又 (9') で見るように $\hat{\ell}^2$ の項以外には θ や ϕ は全く含まれないから、ラプラシアンを極座標で表した時の角度 θ, ϕ に関する演算がすべて $\hat{\ell}^2$ の中に入っているのだということもできる。

もう一つ重要な関係式を導いておこう。交換子 $[\hat{\ell}_\alpha, \hat{\ell}_\beta]$ はどのようなものであろうか。これは、(5) の定義を用いて、労をいとわず計算しさえすればよい。

$$\begin{aligned}
 & [\hat{\ell}_x, \hat{\ell}_y] \\
 &= \left(\frac{\hbar}{i}\right)^2 \left\{ \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y}\right) \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z}\right) - \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z}\right) \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y}\right) \right\} \\
 &= \left(\frac{\hbar}{i}\right)^2 \left\{ y \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial y} \right\} = i\hbar \hat{\ell}_z.
 \end{aligned} \tag{10a}$$

同様に

$$[\hat{\ell}_y, \hat{\ell}_z] = i\hbar \hat{\ell}_x, \quad [\hat{\ell}_z, \hat{\ell}_x] = i\hbar \hat{\ell}_y \tag{10b}$$

も示される。もちろん

$$[\hat{\ell}_x, \hat{\ell}_x] = [\hat{\ell}_y, \hat{\ell}_y] = [\hat{\ell}_z, \hat{\ell}_z] = 0 \tag{10c}$$

でもある。同じようにして次式も示しておこう。

$$\begin{aligned}
 [\hat{\ell}_x, \Delta] &= \frac{\hbar}{i} \left\{ \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y}\right) \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) \right. \\
 &\quad \left. - \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y}\right) \right\} \\
 &= \hat{\ell}_x \Delta - \hat{\ell}_x \Delta = 0.
 \end{aligned} \tag{11a}$$

全く同様にして

$$[\hat{\ell}_y, \Delta] = [\hat{\ell}_z, \Delta] = 0 \tag{11b}$$

も導かれる。すでに示したようにラプラシアン Δ と角運動量演算子 $\hat{\ell}_\alpha$ の自乗の和 $\hat{\ell}^2 = \hat{\ell}_x^2 + \hat{\ell}_y^2 + \hat{\ell}_z^2$ の間には (9') の関係がある。また $\hat{\ell}_\alpha$ は動径成分の微分 $\frac{\partial}{\partial r}$ を含まない。このことから (11a~b) はまた

$$[\hat{\ell}_x, \hat{\ell}^2] = [\hat{\ell}_y, \hat{\ell}^2] = [\hat{\ell}_z, \hat{\ell}^2] = 0 \tag{11c}$$

も意味していることになる。もちろん、 $\hat{\ell}^2$ と $\hat{\ell}_x, \hat{\ell}_y, \hat{\ell}_z$ との交換関係を直接計算しても (11c) が導かれる。

(以下続く)