Angular momentum in spherical coordinate: 球座標系による角運動量

Masahiro Yamamoto

last update on August 25, 2020

1 角運動量の球座標表現

角運動量ベクトルは以下のように定義されることを 18 章で述べた。

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} \tag{1}$$

運動量ベクトルを以下のように定義すると，角運動量ベクトルも演算子となる。

$$\vec{p} = -i\hbar\nabla \tag{2}$$
$$\vec{L} = -i\hbar\vec{r} \times \nabla \tag{3}$$

∇ すなわち grad（勾配）に対する球座標表示は，$\vec{r} = r\mathbf{e}_1$ とおき，WEB の gradient より，

$$\mathrm{grad}_{r,\theta,\phi} = \nabla_{r,\theta,\phi} = \left(\mathbf{e}_1\frac{\partial}{\partial r} + \mathbf{e}_2\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta} + \mathbf{e}_3\frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\right) \tag{4}$$
$$\vec{r} = r\mathbf{e}_1 \tag{5}$$
$$\mathbf{e}_i \times \mathbf{e}_j = \epsilon_{i,j,k}\mathbf{e}_k \tag{6}$$
$$\frac{\hat{\vec{L}}}{-i\hbar r} = \mathbf{e}_1 \times \left(\mathbf{e}_1\frac{\partial}{\partial r} + \mathbf{e}_2\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta} + \mathbf{e}_3\frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\right) = +\mathbf{e}_3\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta} - \mathbf{e}_2\frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi} \tag{7}$$
$$\hat{\vec{L}} = -i\hbar\left(\mathbf{e}_3\frac{\partial}{\partial\theta} - \mathbf{e}_2\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\right) \tag{8}$$

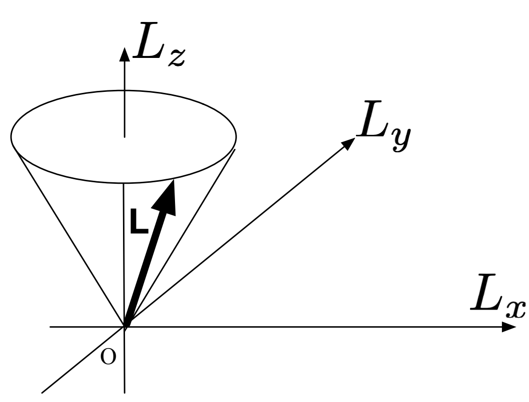

Figure 1: 角運動量のイメージ: ベクトル $\vec{L}$ は z 軸の周りの円錐表面を回転している

2 $\hat{L}_z$ の球座標表現

$\mathbf{k}$ を z 方向の単位ベクトルとする。また，極座標系での単位ベクトルと $\mathbf{k}$ との内積は

$$\mathbf{k} = (0, 0, 1)$$
$$\mathbf{e}_1 = (\sin\theta\cos\phi, \sin\theta\sin\phi, \cos\theta), \quad \mathbf{e}_2 = (\cos\theta\cos\phi, \cos\theta\sin\phi, -\sin\theta), \quad \mathbf{e}_3 = (-\sin\phi, \cos\phi, 0)$$
$$\mathbf{k}\cdot\mathbf{e}_1 = \cos\theta, \quad \mathbf{k}\cdot\mathbf{e}_2 = -\sin\theta, \quad \mathbf{k}\cdot\mathbf{e}_3 = 0 \tag{9}$$

となる。$\hat{L}_z$ は角運動量ベクトルの z 成分，すなわち $\mathbf{k}$ との内積になる。

$$\hat{L}_z \quad = \quad \mathbf{k}\cdot\hat{\vec{L}} = -i\hbar(\sin\theta)\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\phi} \tag{10}$$

3　角運動量の 2 乗の球座標表現

$\hat{\vec{L}}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2$ で定義されるのでそれぞれの成分を求めればよい。

$$\begin{aligned}
\mathbf{i} &= (1,0,0) \\
\mathbf{i}\cdot\mathbf{e}_1 &= \sin\theta\cos\phi, \quad \mathbf{i}\cdot\mathbf{e}_2 = \cos\theta\cos\phi, \quad \mathbf{i}\cdot\mathbf{e}_3 = -\sin\phi & (11)\\
\hat{L}_x &= \mathbf{i}\cdot\hat{\vec{L}} = -i\hbar\left(-\sin\phi\frac{\partial}{\partial\theta} - \cos\theta\cos\phi\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\right) = i\hbar\left(\sin\phi\frac{\partial}{\partial\theta} + \cot\theta\cos\phi\frac{\partial}{\partial\phi}\right) & (12)\\
\mathbf{j} &= (0,1,0) & (13)\\
\mathbf{j}\cdot\mathbf{e}_1 &= \sin\theta\sin\phi, \quad \mathbf{j}\cdot\mathbf{e}_2 = \cos\theta\sin\phi, \quad \mathbf{j}\cdot\mathbf{e}_3 = \cos\phi & (14)\\
\hat{L}_y &= \mathbf{j}\cdot\hat{\vec{L}} = -i\hbar\left(\cos\phi\frac{\partial}{\partial\theta} - \cos\theta\sin\phi\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\right) = i\hbar\left(-\cos\phi\frac{\partial}{\partial\theta} + \cot\theta\sin\phi\frac{\partial}{\partial\phi}\right) & (15)\\
& & (16)
\end{aligned}$$

それぞれの成分の 2 乗を求めよう。

$$\begin{aligned}
\hat{L}_x^2 &= -\hbar^2\left(\sin\phi\frac{\partial}{\partial\theta} + \cot\theta\cos\phi\frac{\partial}{\partial\phi}\right)\left(\sin\phi\frac{\partial}{\partial\theta} + \cot\theta\cos\phi\frac{\partial}{\partial\phi}\right) & (17)\\
&= -\hbar^2\Bigg(\sin^2\phi\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \sin\phi\cos\phi\underbrace{(\cot\theta)'}_{=-1/\sin^2\theta}\frac{\partial}{\partial\phi} + \sin\phi\cos\phi\cot\theta\frac{\partial^2}{\partial\theta\partial\phi} + \cot\theta\cos^2\phi\frac{\partial}{\partial\theta} \\
&\quad + \cot\theta\cos\phi\sin\phi\frac{\partial^2}{\partial\phi\partial\theta} + \cot^2\theta\cos\phi(-\sin\phi)\frac{\partial}{\partial\phi} + \cot^2\theta\cos^2\phi\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\Bigg) & (18)\\
\hat{L}_y^2 &= -\hbar^2\left(-\cos\phi\frac{\partial}{\partial\theta} + \cot\theta\sin\phi\frac{\partial}{\partial\phi}\right)\left(-\cos\phi\frac{\partial}{\partial\theta} + \cot\theta\sin\phi\frac{\partial}{\partial\phi}\right) & (19)\\
&= -\hbar^2\Bigg(\cos^2\phi\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} - \cos\phi\sin\phi\underbrace{(\cot\theta)'}_{=-1/\sin^2\theta}\frac{\partial}{\partial\phi} - \cos\phi\sin\phi\cot\theta\frac{\partial^2}{\partial\theta\partial\phi} - \cot\theta\sin\phi(-\sin\phi)\frac{\partial}{\partial\theta} \\
&\quad - \cot\theta\sin\phi\cos\phi\frac{\partial^2}{\partial\phi\partial\theta} + \cot^2\theta\sin\phi\cos\phi\frac{\partial}{\partial\phi} + \cot^2\theta\sin^2\phi\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\Bigg) & (20)\\
\hat{L}_z^2 &= -\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial\phi^2} & (21)
\end{aligned}$$

3 つの項の和をとると，

$$\begin{aligned}
\hat{L}^2 &= \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2 & (22)\\
&= -\hbar^2\left[(\sin^2\phi + \cos^2\phi)\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \cot\theta(\cos^2\phi + \sin^2\phi)\frac{\partial}{\partial\theta} + \underbrace{(1+\cot^2\theta)}_{=1/\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right] & (23)\\
&= -\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \cot\theta\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right) & (24)\\
&= -\hbar^2\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right] & (25)
\end{aligned}$$

4 固有値，固有関数

18 章で証明したように $[\hat{\vec{L}}^2, \hat{L}_k]=0$ なので (k は x,y,z はどれでもいいが，便宜上 z を考慮する)，同時に確定した固有値をもつ。そのため，2 つの演算子のジョイントした固有関数を考える。

$$\begin{aligned}\hat{\vec{L}}^2|\alpha,\beta\rangle &= \hbar^2\alpha|\alpha,\beta\rangle &(26)\\ \hat{L}_z|\alpha,\beta\rangle &= \hbar\beta|\alpha,\beta\rangle &(27)\\ \langle\alpha',\beta'|\alpha,\beta\rangle &= \delta_{\alpha',\alpha}\delta_{\beta',\beta} &(28)\end{aligned}$$

角運動量の定義から，それぞれ $\hbar^2$,$\hbar$ の次元を持つことは自明である。

今新たな演算子 $\hat{L}_\pm$ を以下のように定義しよう。

$$\begin{aligned}\hat{L}_+ &\equiv \hat{L}_x + i\hat{L}_y &(29)\\ \hat{L}_- &\equiv \hat{L}_x - i\hat{L}_y &(30)\\ & &(31)\end{aligned}$$

また，18 章で以下を証明した。

$$[\hat{L}_x,\hat{L}_y] = i\hbar\hat{L}_z, [\hat{L}_y,\hat{L}_z]=i\hbar\hat{L}_x, [\hat{L}_z,\hat{L}_x]=i\hbar\hat{L}_y, \quad (32)$$

これらの 関係を使って以下の交換関係を満たすことは容易に示せる。(章末問題 20-2 参照)

$$[\hat{\vec{L}}^2,\hat{L}_\pm] = 0, [\hat{L}_+,\hat{L}_-]=2\hbar\hat{L}_z, [\hat{L}_z,\ \hat{L}_\pm]=\pm\hbar\hat{L}_\pm \quad (33)$$

最後の交換関係を使って，以下のように作用させると，

$$\hat{L}_z(\hat{L}_\pm|\alpha,\beta\rangle) = (\hat{L}_\pm\hat{L}_z \pm\hbar\hat{L}_\pm)|\alpha,\beta\rangle = \hbar(\beta\pm1)(\hat{L}_\pm|\alpha,\beta\rangle) \quad (34)$$

となり，$(\hat{L}_\pm|\alpha,\beta\rangle)$ は $\hat{L}_z$ の固有関数となり固有値は $\hbar(\beta\pm1)$ である。同様に，

$$\hat{\vec{L}}^2(\hat{L}_\pm|\alpha,\beta\rangle) = \hat{L}_\pm\hat{\vec{L}}^2|\alpha,\beta\rangle = \hbar^2\alpha(\hat{L}_\pm|\alpha,\beta\rangle) \quad (35)$$

以上より，$\hat{L}_\pm$ は $\hat{\vec{L}}^2$ の固有値 α には影響を与えずに，$\hat{L}_z$ の固有値 β を ±1 変化させる。すなわち，

$$\hat{L}_\pm|\alpha,\beta\rangle = \gamma_{\pm,\alpha\beta}|\alpha,\beta\pm1\rangle \quad (36)$$

とかける。

次に，$\hat{\vec{L}}^2 - \hat{L}_z^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2$ の固有値を考える。

$$\begin{aligned}\langle\alpha,\beta|\hat{\vec{L}}^2 - \hat{L}_z^2|\alpha,\beta\rangle &= \hbar^2(\alpha-\beta^2)\geq 0 &(37)\\ \alpha\geq\beta^2 & &(38)\end{aligned}$$

≥ 0 は，$\hat{L}_x^2+\hat{L}_y^2$ の固有値であることから要求される。この式から β はある最大値をもつことが示唆され, その固有関数に $\hat{L}_+$ を作用すると，

$$\begin{aligned}\beta &\leq \beta_{\max} &(39)\\ \hat{L}_+|\alpha,\beta_{\max}\rangle &= 0 &(40)\end{aligned}$$

また，以下の演算子を考えると，

$$\hat{L}_-\hat{L}_+ = (\hat{L}_x - i\hat{L}_y)(\hat{L}_x+i\hat{L}_y) = \hat{L}_x^2+\hat{L}_y^2 + i\underbrace{[\hat{L}_x,\hat{L}_y]}_{=i\hbar\hat{L}_z} = \hat{L}^2-\hat{L}_z^2-\hbar\hat{L}_z \quad (41)$$

$$\begin{aligned}\hat{L}_-\hat{L}_+|\alpha,\beta_{\max}\rangle &= 0 &(42)\\ &= \hbar^2(\alpha-\beta_{\max}^2-\beta_{\max})|\alpha,\beta_{\max}\rangle &(43)\\ \alpha &= \beta_{\max}(\beta_{\max}+1) &(44)\\ & &(45)\end{aligned}$$

同様に

$$\begin{aligned}
\hat{L}_-|\alpha,\beta_{\rm min}\rangle &= 0 && (46)\\
\hat{L}_+\hat{L}_- &= (\hat{L}_x+i\hat{L}_y)(\hat{L}_x-i\hat{L}_y)=\hat{L}_x^2+\hat{L}_y^2-i\underbrace{[\hat{L}_x,\hat{L}_y]}_{=\,i\hbar\hat{L}_z}=\hat{L}^2-\hat{L}_z^2+\hbar\hat{L}_z && (47)\\
\hat{L}_+\hat{L}_-|\alpha,\beta_{\rm min}\rangle &= 0 && (48)\\
&= \hbar^2(\alpha-\beta_{\rm min}^2+\beta_{\rm min})|\alpha,\beta_{\rm min}\rangle && (49)\\
\alpha &= \beta_{\rm min}(\beta_{\rm min}-1) && (50)\\
& && (51)
\end{aligned}$$

$\beta_{\rm min}$ から $\beta_{\rm max}$ には,1 ずつ増加するので，$\beta_{\rm max}=\beta_{\rm min}+n$ とおける。以上より

$$\begin{aligned}
\alpha &= \beta_{\rm max}(\beta_{\rm max}+1)=\beta_{\rm min}(\beta_{\rm min}-1) && (52)\\
\beta_{\rm max} &= -\beta_{\rm min} && (53)\\
\beta_{\rm max} &= \beta_{\rm min}+n=-\beta_{\rm max}+n && (54)\\
\beta_{\rm max} &= \frac{n}{2} && (55)
\end{aligned}$$

整数または半整数である $n/2$ を l とおき，β を m とおく。

$$\begin{aligned}
l &= \beta_{\rm max}=\frac{n}{2},\quad m=\beta && (56)\\
\alpha &= \beta_{\rm max}(\beta_{\rm max}+1)=l(l+1) && (57)\\
-l &\le m\le l && (58)
\end{aligned}$$

となり，固有値，固有関数は以下のようになる。

$$\begin{aligned}
\hat{\vec{L}}^2|l,m\rangle &= \hbar^2 l(l+1)|l,m\rangle && (59)\\
\hat{L}_z|l,m\rangle &= \hbar m|l,m\rangle && (60)\\
\langle l',m'|l,m\rangle &= \delta_{l',l}\delta_{m,m} && (61)
\end{aligned}$$

角運動量の大きさは, 角運動量ベクトル演算子の二乗の期待値の平方根で定義すると,

$$\sqrt{\langle\hat{\vec{L}}^2\rangle} = \hbar\sqrt{l(l+1)} \qquad (62)$$

例として $l=0,1,2$ の場合を考えよう。(水素原子の波動関数に対応)

$$\begin{aligned}
l &= 0,\quad \sqrt{\langle\hat{\vec{L}}^2\rangle}=0,\quad m=0 && (63)\\
l &= 1,\quad \sqrt{\langle\hat{\vec{L}}^2\rangle}=\sqrt{2}\hbar,\quad m=-1,0,1 && (64)\\
l &= 2,\quad \sqrt{\langle\hat{\vec{L}}^2\rangle}=\sqrt{6}\hbar,\quad m=-2,-1,0,1,2 && (65)
\end{aligned}$$

以上を図示しよう。$l=0$ の時はすべてゼロなので略する。

また，$l=1/2$ の場合を考えよう。(電子のスピンに対応) $\hat{\vec{L}}$ を $\hat{\vec{S}}$，l を s，m を m_s と書くと,

$$s = \frac{1}{2},\quad \sqrt{\langle\hat{\vec{S}}^2\rangle}=\sqrt{2}\hbar,\quad m_s=-\frac{1}{2},\frac{1}{2} \qquad (66)$$

以上を図示しよう。

また，$\hat{L}_\pm$ の固有値も以下のようになることが示される。(章末問題 20-3 参照)

$$\begin{aligned}
\hat{L}_\pm|l,m\rangle &= \hbar\sqrt{l(l+1)-m(m\pm1)}|l,m\pm1\rangle && (67)\\
&= \hbar\sqrt{(l\mp m)(l\pm m+1)}|l,m\pm1\rangle && (68)
\end{aligned}$$

$\hat{L}_x|l,m\rangle,\hat{L}_y|l,m\rangle$ はどうなるか？　また，$\hat{L}_x$ および $\hat{L}_y$ の期待値はどうなるか？(章末問題 20-4 を参照のこと)

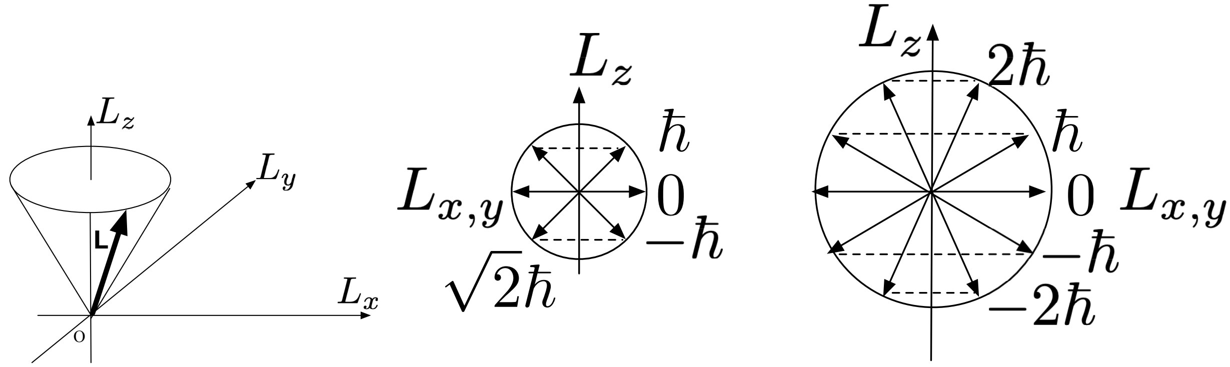

Figure 2: $l = 1$（左），$l = 2$（右）の円錐軸への投影　それぞれの矢印の長さは，$\hbar\sqrt{l(l+1)}$ で，円錐の高さは $m\hbar$ である

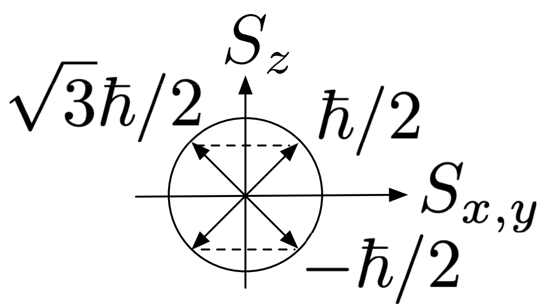

Figure 3: スピン角運動量の回転円錐軸への投影 それぞれの矢印の長さは，$\sqrt{3}\hbar/2$ で，円錐の高さは $\pm\hbar/2$ である