(複習)

$$\hat{L}^2 |Y_{lm}\rangle = \hat{l}^2 \hbar^2 |Y_{lm}\rangle = l(l+1)\hbar^2 |Y_{lm}\rangle$$
$$\hat{L}_z |Y_{lm}\rangle = \hat{l}_z \hbar |Y_{lm}\rangle = m\hbar |Y_{lm}\rangle$$

$$\langle Y_{lm} | Y_{lm}\rangle = \int_0^{\pi} \sin\theta \, d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi \; |Y_{lm}(\theta,\varphi)|^2$$
$$= 1$$

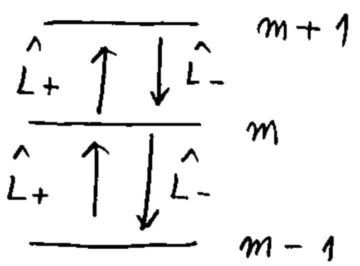
$$\hat{L}_\pm \equiv \hat{L}_x \pm i \hat{L}_y$$

$\downarrow$

$$\hat{L}_\pm |Y_{lm}\rangle = \alpha_\pm |Y_{l\,m\pm1}\rangle$$
$$|\alpha_\pm|^2 = \langle Y_{lm} | (\hat{L}_\pm)^\dagger \hat{L}_\pm | Y_{lm}\rangle$$

$\downarrow$

$$\alpha_\pm = \hbar\sqrt{l(l+1) - m(m\pm1)}$$



"昇降演算子"

$$\hat{L}_+ |Y_{ll}\rangle = 0$$
$$\hat{L}_- |Y_{l\,-l}\rangle = 0 \qquad (-l(-l-1) = l(l+1))$$

(note) m について：

$$L_\pm |Y_{lm}\rangle = \underbrace{\hbar\sqrt{l(l+1)-m(m\pm1)}}_{= |\alpha_\pm|^2} |Y_{l\,m\pm1}\rangle$$

$$\Downarrow \quad l(l+1) \geq m(m\pm1) \qquad (\sqrt{\ }\text{の中身})$$

$$\rightarrow \quad \boxed{-l \leq m \leq l}$$

最小の m を m_{min} とする。

$$\rightarrow \quad L_- |Y_{l\,m_{min}}\rangle = 0$$

$$\Downarrow \quad m_{min} = -l$$

同様に最大の m は $L_+ |Y_{l\,m_{max}}\rangle = 0$ より

$m_{max} = +l$

$L_\pm$ により m の値は 1 ずつ変わる

$$\Downarrow \quad m = -l,\ -l+1,\ \cdots,\ l-1,\ l$$

この条件のみからは l として $\begin{cases} \text{整数} \\ \text{半整数} \end{cases}$ の両方の場合

が許される。

Department Physic
Japan

(note) $\hat{\ell}^2$ の固有値が $\ell(\ell+1)$ となること：

$\hat{\ell}^2$ の固有値を λ とする。

$$\hat{L}_+|Y_{\ell\ell}\rangle = 0 \rightarrow \underbrace{\hat{L}_-\hat{L}_+}_{\hat{L}^2-\hat{L}_z^2-\hbar L_z}|Y_{\ell\ell}\rangle = 0$$

$$= (\lambda - m^2 - m)\hbar^2 |Y_{\ell\ell}\rangle = 0$$
$(m = \ell)$

∴

$$\lambda = \ell^2 + \ell = \ell(\ell+1)$$

Department of Physics
Tohoku University
Sendai, Japan

3. 動径波動関数

3.1. 動径波動関数の従う方程式

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)+\frac{\hat{\ell}^2\hbar^2}{2mr^2}+V(r)-E\right]\psi(\mathbf{r})=0$$

$$\psi(\mathbf{r}) = R_\ell(r)\,Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}})$$ とおくと

$$\boxed{\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\left\{\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)\right\}+\frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2mr^2}+V(r)-E\right]R_\ell(r)=0}$$

更に $\boxed{R_\ell(r) = \frac{u_\ell(r)}{r}}$ とおくと

$$R_\ell' = \frac{u_\ell'}{r} - \frac{u_\ell}{r^2}$$

$$\Leftrightarrow\ r^2 R_\ell' = r u_\ell' - u_\ell$$

$$\Leftrightarrow\ \frac{1}{r^2}\left(r^2 R_\ell'\right)' = \frac{1}{r^2}\left(u_\ell' + r u_\ell'' - u_\ell'\right) = \frac{1}{r}u_\ell''$$

$$\Leftrightarrow\ \boxed{\cancel{\frac{1}{r}}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dr^2}+\frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2mr^2}+V(r)-E\right]u_\ell(r)=0}$$

$\leftrightarrow$ ポテンシャルが

$V(r) \to V(r) + \underbrace{\frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2mr^2}}_{\text{遠心力ポテンシャル}}$ となった時の

1次元シュレーディンガー方程式と同じ形。

(note) 1次元シュレーディンガー方程式:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+V(x)-E\right)\psi(x)=0$$

- 波動関数の規格化

(note) $d\mathbf{r} = r^2 dr\, d\hat{\mathbf{r}}$

$$1 = \int_0^\infty r^2 dr \int d\hat{\mathbf{r}} \; |\psi(\mathbf{r})|^2$$

$$= \int_0^\infty r^2 dr \; |R_\ell(r)|^2 \underbrace{\int d\hat{\mathbf{r}} \; |Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}})|^2}_{=1}$$

$$\Downarrow \quad \int_0^\infty r^2 dr \; |R_\ell(r)|^2 = 1$$

$$\parallel$$

$$\int_0^\infty dr \; |u_\ell(r)|^2$$

- 原点付近での振るまい
  (ただし $\lim_{r \to 0} r^2 V(r) = 0$ とする)

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dr^2} + \frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2mr^2} + V(r) - E \right) u_\ell(r) = 0$$

$r \sim 0$ では

$$\left(-\cancel{\frac{\hbar^2}{2m}}\frac{d^2}{dr^2} + \frac{\ell(\ell+1)\cancel{\hbar^2}}{\cancel{2m}r^2} \right) u_\ell(r) \sim 0$$

$u_\ell(r) = r^k$ とおいて代入

$$\Downarrow \quad \left(-k(k-1) + \ell(\ell+1) \right) r^{k-2} \sim 0$$

$\Downarrow$ $\quad \ell(\ell+1) = k(k-1)$

$\Downarrow$ $\quad k = \ell+1 \,,\ -\ell$

$k = \ell+1 \quad \rightarrow \quad u_\ell(r) \sim r^{\ell+1}$

$R_\ell(r) \sim r^\ell$ ：原点で正則

(note) $u_\ell(0) = 0$

$k = -\ell \quad \rightarrow \quad u_\ell(r) \sim r^{-\ell}$

$R_\ell(r) \sim r^{-\ell-1}$ ：原点で発散

↑

非物理的な解

↑

棄却

3.2. 自由粒子の解

$$V(r) = 0$$

$$\downarrow \left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{d}{dr} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R_l(r) + k^2 R_l(r) = 0$$

$$\uparrow$$

$$E = \frac{k^2\hbar^2}{2m}$$

○ $\rho \equiv kr$ とおくと

$$\frac{d}{dr} = k\frac{d}{d\rho}, \quad \frac{d^2}{dr^2} = k^2\frac{d^2}{d\rho^2}$$

$$\downarrow \left(\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho}\frac{d}{d\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} + 1 \right) R_l(\rho) = 0$$

解： 球ベッセル関数 $j_l(\rho)$

及び 球ノイマン関数 $n_l(\rho)$

○ 定義： $j_l(\rho) = (-\rho)^l \left(\frac{1}{\rho}\frac{d}{d\rho}\right)^l \left(\frac{\sin\rho}{\rho}\right)$

$$n_l(\rho) = -(-\rho)^l \left(\frac{1}{\rho}\frac{d}{d\rho}\right)^l \left(\frac{\cos\rho}{\rho}\right)$$

例） $j_0(\rho) = \frac{\sin\rho}{\rho}$, $n_0(\rho) = -\frac{\cos\rho}{\rho}$

$$j_1(\rho) = \frac{\sin\rho}{\rho^2} - \frac{\cos\rho}{\rho}$$

$$n_1(\rho) = -\frac{\cos\rho}{\rho^2} - \frac{\sin\rho}{\rho}$$ など

漸近形

✓ $\rho \ll l$ で

$$j_l(\rho) \sim \frac{\rho^l}{(2l+1)!!}$$

$$n_l(\rho) \sim -\frac{(2l-1)!!}{\rho^{l+1}}$$

↓ $n_l(\rho)$ は原点で発散

(非物理的解)

ただし $\rho \gtrsim l$ では OK

✓ $\rho \gg l$ で

$$j_l(\rho) \sim \frac{1}{\rho}\sin\left(\rho - \frac{l\pi}{2}\right)$$

$$n_l(r) \sim -\frac{1}{\rho}\cos\left(\rho - \frac{l\pi}{2}\right)$$

(note) 自由粒子の解：

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - \frac{k^2\hbar^2}{2m}\right)\psi(\mathbf{r}) = 0$$

$$\rightarrow \quad \psi(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$$

これは球ベッセル関数とルジャンドル関数を用いて書くことができる：

$$e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} = e^{ikr\cos\theta} = \sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\,i^l\,j_l(kr)\,\underbrace{P_l(\cos\theta)}_{=\sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}}\,Y_{l0}(\theta)}$$