量子力学Ⅰ演習　平成 26 年 6 月 18 日　　　　　　　　　主専攻　　　　　　学籍番号　　　　　　　　氏名

球面調和関数 $Y_l^m(\theta,\phi)=(-1)^{\frac{m+|m|}{2}}\sqrt{\dfrac{2l+1}{4\pi}\dfrac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}}\cdot P_l^{|m|}(\cos\theta)\cdot e^{im\phi}$ は演算子 $\Lambda=\left(\dfrac{1}{\sin\theta}\dfrac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\dfrac{\partial}{\partial\theta}\right)+\dfrac{1}{\sin^2\theta}\dfrac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right)$ に対して、$\Lambda Y_l^m(\theta,\phi)+\lambda Y_l^m(\theta,\phi)=0$ の関係を満たす。ここで、l を零以上の整数として $\lambda=l(l+1)$ であり、m は $|m|\le l$ なる整数、$P_l^{|m|}(\cos\theta)\equiv\sin^{|m|}\theta\dfrac{d^{|m|}}{d(\cos\theta)^{|m|}}\left(\dfrac{1}{2^l l!}\dfrac{d^l}{d(\cos\theta)^l}(\cos^2\theta-1)^l\right)$ である。

（１）　$P_0^0(\cos\theta)$、$P_1^0(\cos\theta)$、$P_1^1(\cos\theta)$ の具体的な関数形を求めよ。

$$P_0^0(\cos\theta)=\sin^0\theta\frac{d^0}{d(\cos\theta)^0}\left(\frac{1}{2^0 0!}\frac{d^0}{d(\cos\theta)^0}(\cos^2\theta-1)^0\right)=1\cdot\frac{1}{1}\cdot 1=1$$

$$P_1^0(\cos\theta)=\sin^0\theta\frac{d^0}{d(\cos\theta)^0}\left(\frac{1}{2^1 1!}\frac{d}{d(\cos\theta)}(\cos^2\theta-1)\right)=1\cdot\frac{1}{2}\cdot 2\cos\theta=\cos\theta$$

$$P_1^1(\cos\theta)=\sin^1\theta\frac{d^1}{d(\cos\theta)^1}\left(\frac{1}{2^1 1!}\frac{d}{d(\cos\theta)}(\cos^2\theta-1)\right)=\sin\theta\frac{d}{d(\cos\theta)}(\cos\theta)=\sin\theta$$

（２）　$Y_0^0(\theta,\phi)$、$Y_1^0(\theta,\phi)$、$Y_1^1(\theta,\phi)$、$Y_1^{-1}(\theta,\phi)$ の具体的な関数形を求めよ。

（１）の結果を用いて

$$Y_0^0(\theta,\phi)=(-1)^{\frac{0+|0|}{2}}\sqrt{\frac{2\cdot 0+1}{4\pi}\frac{(1-|0|)!}{(1+|0|)!}}\cdot P_0^{|0|}(\cos\theta)\cdot e^{i0\phi}=\sqrt{\frac{1}{4\pi}}$$

$$Y_1^0(\theta,\phi)=(-1)^{\frac{0+|0|}{2}}\sqrt{\frac{2\cdot 1+1}{4\pi}\frac{(1-|0|)!}{(1+|0|)!}}\cdot P_1^{|0|}(\cos\theta)\cdot e^{i0\phi}=\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta$$

$$Y_1^1(\theta,\phi)=(-1)^{\frac{1+|1|}{2}}\sqrt{\frac{2\cdot 1+1}{4\pi}\frac{(1-|1|)!}{(1+|1|)!}}\cdot P_1^{|1|}(\cos\theta)\cdot e^{i1\phi}=-\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta\cdot e^{i\phi}$$

$$Y_1^{-1}(\theta,\phi)=(-1)^{\frac{-1+|-1|}{2}}\sqrt{\frac{2\cdot 1+1}{4\pi}\frac{(1-|-1|)!}{(1+|-1|)!}}\cdot P_1^{|-1|}(\cos\theta)\cdot e^{i(-1)\phi}=\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta\cdot e^{-i\phi}$$

（３）　角運動量の大きさの二乗に対する演算子は $|\vec{l}|^2=-\hbar^2\Lambda$ である。$|\vec{l}|^2$ に対する固有関数及び固有値を答えよ。ヒント：固有関数、固有値の定義とは？

$|\vec{l}|^2=-\hbar^2\Lambda$ であり、一方 $\Lambda Y_l^m(\theta,\phi)+l(l+1)Y_l^m(\theta,\phi)=0$ である。従って、$|\vec{l}|^2 Y_l^m(\theta,\phi)=-\hbar^2\Lambda Y_l^m(\theta,\phi)=\hbar^2\lambda Y_l^m(\theta,\phi)=\hbar^2 l(l+1)Y_l^m(\theta,\phi)$ と表わせる。

この式は、$Y_l^m(\theta,\phi)$ が l^2 の固有関数であり、その固有値が $l(l+1)\hbar^2$ であることを示している。

（４）　角運動量の z 成分に対する演算子は $l_z=-i\hbar\dfrac{\partial}{\partial\phi}$ である。l_z の固有関数及び固有値を答えよ。

演算子 $l_z=-i\hbar\dfrac{\partial}{\partial\phi}$ は ϕ に関する偏微分のみである。一方、$Y_l^m(\theta,\phi)$ の ϕ 関数部分は $e^{im\phi}$ のみである。従って、

$l_z Y_l^m(\theta,\phi)=-i\hbar\dfrac{\partial}{\partial\phi}Y_l^m(\theta,\phi)=-i\hbar(im)Y_l^m(\theta,\phi)=m\hbar Y_l^m(\theta,\phi)$。この式は、$Y_l^m(\theta,\phi)$ が l_z の固有関数であり、その固有値が $m\hbar$ であることを示している。

（３）の結果と合わせると、$Y_l^m(\theta,\phi)$ は $|\vec{l}|^2$ と同時に l_z に対しても固有関数（同時固有関数）となっていることが分かる。

（５）　$Y_1^0(\theta,\phi)$ 及び $Y_1^1(\theta,\phi)$ において、その大きさの二乗が最も大きくなる方位を答えよ。また最も小さくなる方位はどこか。

$|Y_1^0(\theta,\phi)|^2=\dfrac{3}{4\pi}\cos^2\theta=\dfrac{3}{4\pi}\dfrac{1+\cos 2\theta}{2}$ であるから、$\theta=0,\pi$ となる z 軸に沿った方位で最大 $\dfrac{3}{4\pi}$、$\theta=\pi/2$ の xy 面上の各方位で最小 0 になる。（すなわち、$Y_1^0(\theta,\phi)$ で表される運動状態では z 軸に沿った方向で粒子の存在確率が最大、xy 面上の各方位で零となる。）一方、$|Y_1^1(\theta,\phi)|^2=\dfrac{3}{8\pi}\sin^2\theta=\dfrac{3}{8\pi}\dfrac{1-\cos 2\theta}{2}$ であるから、$\theta=\pi/2$ の xy 面上の各方位で最大 $\dfrac{3}{8\pi}$、$\theta=0,\pi$ となる z 軸に沿った方向で最小 0 になる。（ちなみに $|Y_1^{-1}(\theta,\phi)|^2$ の場合も同じ）。

（６）　$Y_1=\frac{1}{\sqrt{3}}\left(Y_1^{\,0}(\theta,\phi)+Y_1^{\,1}(\theta,\phi)+Y_1^{\,-1}(\theta,\phi)\right)$とするとき、その大きさの二乗の空間積分を求めよ。ヒント：$\iint\left(Y_{l'}^{m'}(\theta,\phi)\right)^* Y_l^{m}(\theta,\phi)\sin\theta d\theta d\phi=\delta_{l'l}\delta_{m'm}$

$$\iint Y_1^{\,*}Y_1\sin\theta d\theta d\phi=\frac{1}{3}\iint\left(Y_1^{\,0}+Y_1^{\,1}+Y_1^{\,-1}\right)^*\left(Y_1^{\,0}+Y_1^{\,1}+Y_1^{\,-1}\right)\sin\theta d\theta d\phi$$

$$=\frac{1}{3}\iint\left(\left|Y_1^{\,0}\right|^2+\left|Y_1^{\,1}\right|^2+\left|Y_1^{\,-1}\right|^2\right)\sin\theta d\theta d\phi+\frac{1}{3}\iint\left(Y_1^{\,0*}Y_1^{\,1}+Y_1^{\,0*}Y_1^{\,-1}+Y_1^{\,1*}Y_1^{\,0}+Y_1^{\,1*}Y_1^{\,-1}+Y_1^{\,-1*}Y_1^{\,0}+Y_1^{\,-1*}Y_1^{\,1}\right)\sin\theta d\theta d\phi$$

$$=\frac{1}{3}\times 3+\frac{1}{3}\times 0=1$$

ちなみに２行目の式において前の項の被積分関数に注目すると$\left|Y_1^{0}(\theta,\phi)\right|^2+\left|Y_1^{1}(\theta,\phi)\right|^2+\left|Y_1^{-1}(\theta,\phi)\right|^2=\frac{3}{4\pi}\cos^2\theta+\frac{3}{8\pi}\sin^2\theta+\frac{3}{8\pi}\sin^2\theta=\frac{3}{4\pi}$と定数になる。

（７）　定常状態にある粒子の回転運動を量子力学的に考えるとき、古典力学では説明できない事象について述べよ。

例えば、①角運動量の大きさの二乗l^2及びそのz方向成分l_zは連続値とならず、それぞれ整数l及びmを用いて量子化される、②z方向成分l_zの大きさは常に角運動量の大きさの二乗l^2の平方根より小さい（$m\hbar<\sqrt{l(l+1)\hbar^2}$、$\because |m|\le l$）、③角運動量の大きさの二乗$l^2$とその$z$方向成分$l_z$の二つの値しか同時に決定できない（$l_z$、$l_z$、$l_z$の三つの値（あるいはこれらのうちの二つと角運動量の大きさの二乗）を同時に決定できない。このことも不確定性原理が関係している）。

（８）　球面上を定常状態で回転運動している粒子を量子力学的に考えるとき、角運動量の大きさは同じだが運動の様子が異なる状態はいくつあるか。

球面調和関数$Y_l^{m}(\theta,\phi)$において、角運動量の大きさを決定するl（方位量子数）を固定して考えた場合、$m=-l,-l+1,\cdots,0,\cdots,l-1,l$と$2l+1$通りの$m$（磁気量子数）が異なる関数が存在する。従って、量子力学的には角運動量の大きさの二乗l^2の固有値が$\hbar^2 l(l+1)$と同じになっても、そのz方向成分l_zの固有値$m\hbar$が異なる状態は$2l+1$個存在することになる。ここで$\iint\left(Y_{l'}^{m'}(\theta,\phi)\right)^* Y_l^{m}(\theta,\phi)\sin\theta d\theta d\phi=\delta_{l'l}\delta_{m'm}$であるので、これらの状態は互いに直交している。

（９）　$\varphi_{p_x}=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(-Y_1^{1}(\theta,\phi)+Y_1^{-1}(\theta,\phi)\right)$、$\varphi_{p_y}=\frac{-1}{\sqrt{2}i}\left(Y_1^{1}(\theta,\phi)+Y_1^{-1}(\theta,\phi)\right)$の一次結合を変数$r,x,y$のみを用いて表わせ。

$$\varphi_{p_x}=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(-Y_1^{1}(\theta,\phi)+Y_1^{-1}(\theta,\phi)\right)=\frac{1}{\sqrt{2}}\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta\left(e^{i\phi}+e^{-i\phi}\right)=\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\sin\theta\cos\phi=\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\frac{x}{r}$$

$$\varphi_{p_y}=\frac{-1}{\sqrt{2}i}\left(Y_1^{1}(\theta,\phi)+Y_1^{-1}(\theta,\phi)\right)=\frac{-1}{\sqrt{2}i}\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta\left(-e^{i\phi}+e^{-i\phi}\right)=\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\sin\theta\sin\phi=\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\frac{y}{r}$$

元々は複素関数である$Y_1^{1}(\theta,\phi)$、$Y_1^{-1}(\theta,\phi)$の線形結合を考えることでφ_{p_x}、φ_{p_y}という実関数が導かれる。さらに、$\varphi_{p_z}=Y_1^{\,0}(\theta,\phi)=\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta=\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\frac{z}{r}$と表わされるから、$\varphi_{p_x}$、$\varphi_{p_y}$、$\varphi_{p_z}$は互いに規格直交化されており、かつそれぞれ$x$軸、$y$軸、$z$軸に沿った方位で絶対値が最大となる関数となっている（これらが教科書などでx軸、y軸、z軸方向に延びたp軌道の角度分布として記述されているものに相当する）。

（１０）　φ_{p_x}、φ_{p_y}、φ_{p_z}にはそれぞれ節（常に値が零となる面）が１つあることを示せ。

$\varphi_{p_x}=\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\sin\theta\cos\phi=\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\frac{x}{r}$ゆえ、$x=0$となる$yz$面で値は常に零となる、すなわち$yz$面が節となっている。一方、$x$軸方位で絶対値最大である。

同様にφ_{p_x}ではxz面が節でありy軸方位で絶対値最大、φ_{p_z}ではxy面が節でありz軸方位で絶対値最大となっている。

（１１）　φ_{p_x}、φ_{p_y}、φ_{p_z}はl^2やl_zの固有関数になっているかどうか確かめよ。

$$\left|\vec{l}\right|^2\varphi_{p_x}=-\hbar^2\Lambda\varphi_{p_x}=\frac{-\hbar^2}{\sqrt{2}}\Lambda\left(-Y_1^{1}(\theta,\phi)+Y_1^{-1}(\theta,\phi)\right)=\frac{-\hbar^2}{\sqrt{2}}\left(-(-1(1+1))Y_1^{1}(\theta,\phi)-1(1+1)Y_1^{-1}(\theta,\phi)\right)=2\hbar^2\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\left(-Y_1^{1}(\theta,\phi)+Y_1^{-1}(\theta,\phi)\right)\right)=2\hbar^2\varphi_{p_x}$$

よって、φ_{p_x}はl^2の固有関数であり、その固有値は$2\hbar^2$（$Y_1^{1}(\theta,\phi)$あるいは$Y_1^{-1}(\theta,\phi)$と同じ）。ところが、φ_{p_x}にl_zを演算すると、

$$l_z\varphi_{p_x}=\frac{1}{\sqrt{2}}l_z\left(-Y_1^{1}(\theta,\phi)+Y_1^{-1}(\theta,\phi)\right)=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(-\hbar Y_1^{1}(\theta,\phi)-\hbar Y_1^{-1}(\theta,\phi)\right)=\hbar\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\left(-Y_1^{1}(\theta,\phi)-Y_1^{-1}(\theta,\phi)\right)\right)$$

となってしまう。すなわち、φ_{p_x}はl_zの固有関数になっていない。同様にφ_{p_y}もl^2の固有関数ではあるがl_zの固有関数にはなっていない。φ_{p_z}は元々$Y_1^{\,0}(\theta,\phi)$であるから、l^2とl_zに対する同時固有関数である。