＝＝＝＝＝＝＝＝＝＝＝＝＝＝＝＝＝＝＝＝＝＝＝＝＝＝＝＝＝＝＝＝＝＝＝

動径運動量演算子について

2003. 12. 07 by KENZOU

＝＝＝＝＝＝＝＝＝＝＝＝＝＝＝＝＝＝＝＝＝＝＝＝＝＝＝＝＝＝＝＝＝＝＝

【序】

問題とするポイントを書いておく。

[A]ハミルトニアンをデカルト座標で表してから、それを極座標に変換したハミルトニアン

[B]最初から系のハミルトニアンを極座標で書いた場合のハミルトニアン

**　　は異なる形となる。**

ではどちらのハミルトニアンが正解なのか。この答えは、実験結果をキチンと説明することができる[A]のハミルトニアンが正しい。それでは何故[B]はだめなのか、求めるハミルトニアンを最初から極 球)座標で書くことは出来ないのか、一旦デカルト座標で書いてそれから変換しなければならないのか、、、こうした疑問を以下に解明していくことにする。

【1】中心力ポテンシャルが作用している粒子のハミルトニアンをデカルト座標で書くと

$$H=\frac{1}{2}(m\dot{x}^2+m\dot{y}^2)+V(x,y)=\frac{1}{2m}\left(p_x^2+p_y^2\right)+V(x,y) \tag{1}$$

ここで $p_x=m\dot{x}$, $p_y=m\dot{y}$ **を使った。量子力学に移行するには次ぎの置き換えをすればよい。**

＜古典＞　　　　＜量子力学＞

$$p_x=m\dot{x} \longrightarrow p_x=-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$$
$$p_y=m\dot{y} \longrightarrow p_y=-i\hbar\frac{\partial}{\partial y} \tag{2}$$

量子力学のハミルトニアンは従って

$$H=-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial^2 x}+\frac{\partial^2}{\partial^2 y}\right)+V(rcosq\ ,rsinq) \tag{3}$$

【2】次ぎにこの系のハミルトニアンを最初から極座標で書くと、$p_r=m\dot{r}$, $p_q=mr\dot{q}$ **を使って**

$$H=\frac{1}{2m}\left(p_r^2+\frac{p_q^2}{r^2}\right)+V(rcosq,\ rsinq) \tag{4}$$

上の議論と同様に、量子力学に移行するには次ぎの置き換えをすればよいことになる。

＜古典＞　　　　＜量子力学＞

$$p_r=m\dot{r} \longrightarrow p_r=-i\hbar\frac{\partial}{\partial r} \tag{5}$$
$$p_q=m\dot{q} \longrightarrow p_q=-i\hbar\frac{\partial}{\partial q}$$

その結果ハミルトニアンは

$$H=-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial^2 r}+\frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial^2 q}\right)+V(rcosq,\ rsinq) \tag{6}$$

【3】デカルト座標で書いた（3）の量子力学ハミルトニアンを極座標に変換すると

$$\frac{\partial^2}{\partial^2 x}+\frac{\partial^2}{\partial^2 y}=\frac{\partial^2}{\partial^2 r}+\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial^2 q}=\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial}{\partial r}\right)+\frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial^2 q} \tag{7}$$

を使って

$$H=-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial}{\partial r}\right)+\frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial^2 q}\right]+V(rcosq\ ,rsinq) \tag{8}$$

となる。しかし、このハミルトニアンは明らかに（6）のハミルトニアンと異なる。一体どっちのハミルトニアンが実験と一致する結果を与えるのか。。。正解は（8）のハミルトニアンが正しい。すると動径方向の運動量演算子p_r を $p_r=-i\hbar\partial_r$ と置き換えたことがいけないということになる。これは p_r がエルミート演算子にはならないことがその原因である。以下にその辺りの事情を調べる。

【4】３次元動径方向のエルミート運動量演算子について

古典力学では$p_r=(1/r)(\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p})$ と書ける。これを量子力学に持ちこむには$\boldsymbol{r}, \boldsymbol{p}$ を演算子と考えればよい。これは位置と運動量の演算子であるから可換でない $(\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p}\neq\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r})$ ことに注意しよう。さて、p_r の複素共役をとると、$\boldsymbol{r}, \boldsymbol{p}$ はエルミート演算子であるから $\boldsymbol{r}^\dagger=\boldsymbol{r}$, $\boldsymbol{p}^\dagger=\boldsymbol{p}$ の関係を使って

$$p_r^\dagger=\left(\frac{1}{r}\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p}\right)^\dagger=\boldsymbol{p}^\dagger\cdot\boldsymbol{r}^\dagger\left(\frac{1}{r}\right)^\dagger=\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}\left(\frac{1}{r}\right)\neq p_r \tag{9}$$

これからp_r はエルミート演算子にはならないことが分かる。p_r を観測可能量と結びつけるにはどうしてもエルミート性を獲得しなければならないが、ではどうすればいいのか、、、。（9）をよく眺めると複素共役をとった場合、$\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p}\to\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}$ とひっくり返っていることがエルミート性を保証しない要因であることがわかる。すると最初に、ひっくりかえるもの同士をとり込んでおけば、複素共役をとったときにひっくりかえっても元のものと同じになろう。そのようにp_r を定義しておけばこの困難を切り抜けることができる。ということで、このことを数式で書くと

$$p_r\equiv\frac{1}{2}\left(\frac{\boldsymbol{r}}{r}\cdot\boldsymbol{p}+\boldsymbol{p}\cdot\frac{\boldsymbol{r}}{r}\right) \tag{10}$$

となる。その操作を ” 対象化する ” というが、（１０）を使えばp_r は確かにエルミート演算子になりメデタシメデタシ。しかし、まだ確認しなければならない事柄がある。p_r が動径 r の共役運動量となっているかということである。つまり $[p_r, r]=-i\hbar$ が成立しているのかということを確認しなければならない。早速この計算に入る。

$$[p_r, r]=\frac{1}{2}\left[\left(\frac{\boldsymbol{r}}{r}\cdot\boldsymbol{p}+\boldsymbol{p}\cdot\frac{\boldsymbol{r}}{r}\right), r\right]=\frac{1}{2}\left\{\left(\frac{\boldsymbol{r}}{r}\cdot\boldsymbol{p}+\boldsymbol{p}\cdot\frac{\boldsymbol{r}}{r}\right)r-r\left(\frac{\boldsymbol{r}}{r}\cdot\boldsymbol{p}+\boldsymbol{p}\cdot\frac{\boldsymbol{r}}{r}\right)\right\}$$

$$=\frac{1}{2}\left\{\left(\frac{1}{r}\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p}\,r-r\,\boldsymbol{p}\cdot\frac{\boldsymbol{r}}{r}\right)+(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p})\right\} \tag{11}$$

（１１）の右辺第１項を第１成分表示で書くと

$$\frac{x_1}{r}p_1 r-r\,p_1\frac{x_1}{r}=\frac{x_1}{r}[p_1, r]+r\left[\frac{x_1}{r}, p_1\right] \tag{12}$$

ここで天下り的であるが、p, q の関数 f, g に対して成り立つ次ぎの関係式を使う。

$$\frac{\partial f}{\partial q}=\frac{i}{\hbar}[p\,,f]\,,\quad \frac{\partial g}{\partial q}=-\frac{i}{\hbar}[p\,,g] \tag{13-1}$$

$$\frac{\partial}{\partial q}(f\,g)=\frac{i}{\hbar}[p,f\,g] \tag{13-2}$$

$$\frac{\partial f}{\partial q_r}=\frac{i}{\hbar}[p_r\,,f]\,,\quad \frac{\partial f}{\partial p_r}=-\frac{i}{\hbar}[q_r\,,f] \tag{13-3}$$

(13-1)より

$$[p_1,r]=-i\hbar\frac{\partial r}{\partial x_1}=-i\hbar\frac{\partial}{\partial x_1}\sqrt{x_1^2+x_2^2+x_3^2}=-i\hbar\frac{x_1}{r} \tag{１３}$$

(13-2)より

$$\left[\frac{x_1}{r},p_1\right]=-i\hbar\frac{\partial}{\partial x_1}\left(\frac{x_1}{r}\right)=-i\hbar\left(\frac{1}{r}-\frac{x_1^2}{r^3}\right) \tag{１４}$$

これらを（１２）に代入すると

$$\frac{x_1}{r}p_1r-r\,p_1\frac{x_1}{r}=-i\hbar\frac{x_1^2}{r^2}+i\hbar-i\hbar\frac{x_1^2}{r^2}=-i\hbar\frac{2x_1^2}{r^2}+i\hbar \tag{１５}$$

ほかの成分も同様に計算すると、結局

$$\frac{1}{r}\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p}\,r-r\,\boldsymbol{p}\cdot\frac{\boldsymbol{r}}{r}=-i\hbar \tag{１６}$$

となる。（１１）の右辺第2項は $\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p}=-i\hbar$ であるから（１１）は

$$[p_r\,,r]=-i\hbar \tag{１７}$$

となり、めでたく正準交換関係が成立することを証明できた。これで晴れて動径方向の運動量演算子は

$$p_r\equiv\frac{1}{2}\left(\frac{\boldsymbol{r}}{r}\cdot\boldsymbol{p}+\boldsymbol{p}\cdot\frac{\boldsymbol{r}}{r}\right)$$

であるということが言える。ところでこのままでは形がすっきりしないので、次ぎにもっとスッキリする形を求めていこう。

【５】球座標形式でのエルミート運動量演算子

（１０）より（１４）を使って

$$p_r\equiv\frac{1}{2}\left(\frac{\boldsymbol{r}}{r}\cdot\boldsymbol{p}+\boldsymbol{p}\cdot\frac{\boldsymbol{r}}{r}\right)=\frac{\boldsymbol{r}}{r}\cdot\boldsymbol{p}+\frac{1}{2}\left[\boldsymbol{p},\frac{\boldsymbol{r}}{r}\right]=\frac{\boldsymbol{r}}{r}\cdot\boldsymbol{p}-i\hbar\frac{1}{2r}\left(\frac{x_1^2+x_2^2+x_3^2}{r^2}-3\right)$$

$$=\frac{1}{r}(\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p}-i\hbar) \tag{１８}$$

一方、$x_1=rsinq\ cosf,\ x_2=rsinq\ sinf,\ x_3=rcosq$ であるから

$$\frac{\partial x_1}{\partial r}=\frac{x_1}{r},\ \frac{\partial x_2}{\partial r}=\frac{x_2}{r},\ \frac{\partial x_3}{\partial r}=\frac{x_3}{r}\ \longrightarrow\ \frac{\partial x_i}{\partial r}=\frac{x_i}{r} \tag{19}$$

また、

$$\frac{\partial}{\partial r}=\sum_{i=1}^{3}\frac{\partial x_i}{\partial r}\frac{\partial}{\partial x_i}=\frac{i}{\hbar}\sum_{i=1}^{3}\frac{x_i}{r}p_i=\frac{i}{\hbar}\frac{\boldsymbol{r}}{r}\cdot\boldsymbol{p} \tag{20}$$

となるから（１８）は

$$p_r=-i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r}\right)=-i\hbar\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}r \tag{21}$$

となる。これで非常にスッキリした形となった。ちなみに p_r^2 を計算すると

$$p_r^2=-\hbar^2\left(\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r}\right)\left(\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r}\right)=-\hbar^2\left\{\frac{\partial^2}{\partial^2 r}+\frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{1}{r}\right)+\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r^2}\right\}$$

$$=-\hbar^2\left\{\frac{\partial^2}{\partial^2 r}-\frac{1}{r^2}+\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r^2}\right\}=-\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial^2 r}+\frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right)$$

$$=-h^2\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) \tag{22}$$

となる。これは球座標で書いた正しいハミルトニアン（おまけ参照）の動径運動量の自乗の部分である。ここで次ぎの計算に備え、微分演算子を調べておく。

$$\frac{\partial K(x_i)}{\partial r}=\sum_i\frac{\partial K}{\partial x_i}\frac{\partial x_i}{\partial r}=\sum_i\frac{\partial K}{\partial x_i}\frac{x_i}{r} \tag{23}$$

これから被演算関数Kを外すと

$$\frac{\partial}{\partial r}=\sum_i\frac{x_i}{r}\frac{\partial}{\partial x_i} \tag{24}$$

（２４）より

$$\frac{\partial^2}{\partial r^2}=\frac{1}{r^2}\sum_{i,j}x_i\,x_j\frac{\partial^2}{\partial x_i\partial x_j} \tag{24}$$

という関係が得られる。（２３）（２４）を（２２）に代入すると

$$p_r^2=-\frac{\hbar^2}{r^2}\left(\sum_{i,j}x_i\,x_j\frac{\partial^2}{\partial x_i\partial x_j}+2\sum_i\frac{x_i}{r}\frac{\partial}{\partial x_i}\right) \tag{25}$$

となる。角運動量演算子 $\boldsymbol{L}$ を導入する。$\boldsymbol{L}$ の定義を（２６）で与える。

$$L_i = x_j p_k - x_k p_j = -i\hbar\left(x_j\frac{\partial}{\partial x_k} - x_k\frac{\partial}{\partial x_j}\right),\ (i,j,k)\ \text{は1,2,3の循環的置換} \qquad （２６）$$

$$\boldsymbol{L}^2 = \sum L_i^2 = -\frac{\hbar^2}{2}\sum_{i\neq j}\left(x_i\frac{\partial}{\partial x_j}x_i\frac{\partial}{\partial x_j} - x_i\frac{\partial}{\partial x_j}x_j\frac{\partial}{\partial x_i} - x_j\frac{\partial}{\partial x_i}x_i\frac{\partial}{\partial x_j} + x_j\frac{\partial}{\partial x_i}x_j\frac{\partial}{\partial x_i}\right)$$

$$= -\hbar^2\sum_{i\neq j}\left(x_i x_i\frac{\partial^2}{\partial x_j x_j} - x_i\frac{\partial}{\partial x_i} - x_i x_j\frac{\partial^2}{\partial x_j \partial x_i}\right)$$

$$= -\hbar^2\left(\sum_i r^2\frac{\partial}{\partial x_i}\frac{\partial}{\partial x_i} - \sum_{i,j}x_i x_j\frac{\partial^2}{\partial x_j\partial x_i} - 2\sum_i x_i\frac{\partial}{\partial x_i}\right)$$

（２５）を代入すると

$$= -r^2\hbar^2\left(\sum_i\frac{\partial}{\partial x_i}\frac{\partial}{\partial x_i} + \frac{1}{\hbar}p_r^2\right) = -r^2\left(-\boldsymbol{p}^2 + p_r^2\right) \qquad （２７）$$

これから

$$\boldsymbol{p}^2 = p_r^2 + \frac{\boldsymbol{L}^2}{r^2} \qquad （２８）$$

が導かれる。ちなみに$\boldsymbol{L}^2$を球座標で表すと

$$\boldsymbol{L}^2 = -\hbar^2\left[\frac{1}{sinq}\frac{\partial}{\partial q}\left(sinq\frac{\partial}{\partial q}\right) + \frac{1}{sin^2 q}\frac{\partial^2}{\partial^2 f^2}\right] \qquad （２９）$$

となる。

【おまけ】
古典力学でのハミルトニアンと量子力学でのハミルトニアンを書いておく。

＜古典力学＞

$$H = \frac{1}{2m}\left(p_r^2 + \frac{p_q^2}{r^2} + \frac{p_f^2}{r^2 sin^2 q}\right) + V(r) \qquad （２３）$$

＜量子力学＞

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\left\{\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2 sinq}\frac{\partial}{\partial q}\left(sinq\frac{\partial}{\partial q}\right) + \frac{1}{r^2 sin^2 q}\frac{\partial^2}{\partial^2 f^2}\right\} + V(r) \qquad （２４）$$

【おまけの補足】
ハミルトニアンを $H = \frac{1}{2m}\boldsymbol{p}^2 + V(r)$ とするとハイゼンベルグの運動方程式 $\frac{dr}{dt} = \frac{1}{\hbar}[H, r]$ より得られる $m\dot{r}$ が（１０）に一致することが分かる。是非一度ＴＲＹしてみてください。

(以上)