

球対称な系における粒子の運動について

齊藤雅流

2026 年 6 月

目次

§ 1. 用いる数学的操作	2
1.1 極座標系における操作	2
1.2 特殊関数	3
§ 2. 球対称な場におけるシュレーディンガー方程式	8
2.1 球対称な場におけるシュレーディンガー方程式	8
2.2 球面調和関数	9
2.3 角運動量	10
2.4 動径方程式	11
§ 3. 2 体問題	16
3.1 古典力学における重心運動の分離	16
3.2 量子系における重心運動の分離	17

§ 1. 用いる数学的操作

1.1 極座標系における操作

球対称な系を扱うときには、極座標を用いると扱いやすい。

命題 1.1 極座標ラプラシアン 極座標におけるラプラシアンは以下のように与えられる。

$$\Delta = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2}$$

ラプラシアンは、3次元直交座標では、

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \quad (1.1.1)$$

で与えられ、極座標では、

$$\begin{aligned} x &= r \sin \theta \cos \phi, \\ y &= r \sin \theta \sin \phi, \\ z &= r \cos \theta \end{aligned} \quad (1.1.2)$$

を用いて、変数変換することで命題 1.1 が得られる。

命題 1.2

$$\Delta \left(\frac{1}{r} \right) = -4\pi \delta(r)$$

まず $r \neq 0$ の時について考える。命題 1.1 より、

$$\begin{aligned} \Delta \left(\frac{1}{r} \right) &= \left\{ \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right\} \frac{1}{r} \\ &= \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \frac{1}{r} \right) \\ &= \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (-1) = 0. \end{aligned} \quad (1.1.3)$$

次に $r = 0$ の時, 半径 a の球において,

$$\begin{aligned}
 \int_V \Delta \left(\frac{1}{r} \right) dV &= \oint_S \nabla \left(\frac{1}{r} \right) \cdot \mathbf{n} dS \\
 &= - \oint_S \frac{\mathbf{r} \cdot \mathbf{n}}{r^3} dS \quad (\because \mathbf{r} \cdot \mathbf{n} = r) \\
 &= - \frac{1}{a^2} \oint_S dS \\
 &= - \frac{1}{a^2} \cdot 4\pi a^2 \\
 &= -4\pi.
 \end{aligned} \tag{1.1.4}$$

よって, デルタ関数を用いて, 命題 1.2 が得られる.

1.2 特殊関数

球面調和関数を求める際に, ルジャンドル多項式を用いる.

命題 1.3 ルジャンドルの微分方程式 ルジャンドルの微分方程式,

$$\frac{d}{dx} \left[(1-x^2) \frac{dP_n(x)}{dx} \right] + n(n+1)P_n(x) = 0$$

の解 $P_n(x)$ は,

$$\sum_{n=0}^{\infty} P_n(x)t^n = G(t, x) = \frac{1}{\sqrt{1-2xt+t^2}}$$

を満たす.

まず $P_n(x)$ の漸化式を作る. $G(t, x)$ を t で微分すると,

$$\frac{\partial}{\partial t} G(t, x) = \frac{x-t}{1-2xt+t^2} G(t, x) \tag{1.2.1}$$

となる. また,

$$\frac{\partial}{\partial t} G(t, x) = \sum_{n=1}^{\infty} nP_n(x)t^{n-1} \tag{1.2.2}$$

となることを用いて, 漸化式,

$$\sum_{n=1}^{\infty} nP_n(x)t^{n-1} = \frac{x-t}{1-2xt+t^2} \sum_{n=0}^{\infty} P_n(x)t^n \tag{1.2.3}$$

を展開し、係数比較することで、

$$P_{n+1}(x) = \frac{2n+1}{n+1}xP_n(x) - \frac{n}{n+1}P_{n-1}(x), \quad P_0(x) = 1, \quad P_1(x) = x \quad (n \geq 1) \quad (1.2.4)$$

が得られる。

次に、 $P_n(x)$ の微分方程式を作る。 $G(t, x)$ を x について微分すると、

$$\frac{\partial}{\partial x}G(t, x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{dP_n(x)}{dx} t^n = \frac{t}{1-2xt+t^2}G(t, x) \quad (1.2.5)$$

となり、前と同様に展開していくと、

$$P'_{n+1}(x) - 2xP'_n(x) + P'_{n-1}(x) = P_n(x) \quad (n \geq 1) \quad (1.2.6)$$

が得られる。ここで、(1.2.4) を微分すると、

$$(n+1)P'_{n+1}(x) + nP'_{n-1}(x) = (2n+1)\{P_n(x) + xP'_n(x)\} \quad (1.2.7)$$

となり、(1.2.6) と連立すると、

$$P'_{n+1}(x) = (n+1)P_n(x) + xP'_n(x), \quad (1.2.8)$$

$$P'_{n-1}(x) = -nP_n(x) + xP'_n(x) \quad (1.2.9)$$

を得る。最後に、(1.2.8), (1.2.9) の項数と次数を調節して整理することで、

$$(1-x^2)\frac{d^2P_n(x)}{dx^2} - 2x\frac{dP_n(x)}{dx} + n(n+1)P_n(x) = 0 \quad (1.2.9')$$

となり、第1項と第2項をまとめると、命題 1.3 が得られる。

命題 1.4 ロドリゲスの公式 ルジャンドルの微分方程式 (命題 1.3) の多項式解は、以下のように表される。

$$P_n(x) = \frac{1}{2^n n!} \frac{d^n}{dx^n} (x^2 - 1)^n.$$

命題 1.3 より、母関数、

$$\sum_{n=0}^{\infty} P_n(x)t^n = \frac{1}{\sqrt{1-2xt+t^2}} \quad (1.2.10)$$

の両辺をそれぞれ展開していくことで確認する．まず右辺については,

$$1 - 2xt + t^2 = (1 - xt)^2 - (x^2 - 1)t^2 \quad (1.2.11)$$

とし, 二項展開を用いて,

$$\begin{aligned} \frac{1}{\sqrt{1 - 2xt + t^2}} &= \frac{1}{1 - xt} \left(1 - \frac{x^2 - 1}{(1 - xt)^2} t^2 \right)^{-1/2} \\ &= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(2k)!}{2^{2k}(k!)^2} \frac{(x^2 - 1)^k}{(1 - xt)^{2k+1}} t^{2k} \\ &= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(2k)!}{2^{2k}(k!)^2} (x^2 - 1)^k t^{2k} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(2k+m)!}{(2k)!m!} x^m t^m \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{\lfloor n/2 \rfloor} \frac{n!}{2^{2k}(k!)^2(n-2k)!} (x^2 - 1)^k x^{n-2k} t^n \quad (\because 2k+m=n). \end{aligned} \quad (1.2.12)$$

より, 母関数からは,

$$P_n(x) = \sum_{k=0}^{\lfloor n/2 \rfloor} \frac{n!}{2^{2k}(k!)^2(n-2k)!} (x^2 - 1)^k x^{n-2k} \quad (1.2.13)$$

が得られた．続いて, ロドリゲスの公式を展開する．まず,

$$(x^2 - 1)^n = \sum_{j=0}^n \binom{n}{j} x^{2j} (-1)^{n-j} \quad (1.2.14)$$

と展開できる．ここで,

$$\frac{d^n}{dx^n} x^{2j} = \frac{(2j)!}{(2j-n)!} x^{2j-n} \quad (1.2.15)$$

より,

$$\begin{aligned} \frac{1}{2^n n!} \frac{d^n}{dx^n} (x^2 - 1)^n &= \sum_{j=\lfloor n/2 \rfloor}^n \frac{1}{2^n n!} \binom{n}{j} (-1)^{n-j} \frac{(2j)!}{(2j-n)!} x^{2j-n} \\ &= \sum_{k=0}^{\lfloor n/2 \rfloor} \frac{(2n-2k)!}{2^n k!(n-k)!(n-2k)!} x^{n-2k}. \end{aligned} \quad (1.2.16)$$

より, (1.2.13) と一致するので命題 1.4 が示される．

命題 1.5 ルジャンドルの陪微分方程式 ルジャンドルの陪微分方程式,

$$\frac{d}{dz} \left[(1 - z^2) \frac{dP^m(z)}{dz} \right] + \left(\lambda - \frac{m^2}{1 - z^2} \right) P^m(z) = 0$$

の解は、命題 1.4 の解を用いて、

$$P^m = (1 - z^2)^{\frac{|m|}{2}} \frac{d^{|m|} P}{dz^{|m|}}$$

と表される。

命題 1.3 より、ルジャンドルの微分方程式、

$$\begin{aligned} & \frac{d}{dz} \left[(1 - z^2) \frac{dP}{dz} \right] + \lambda P = 0 \\ \iff & (1 - z^2) \frac{d^2 P}{dz^2} - 2z \frac{dP}{dz} + \lambda P = 0 \end{aligned} \quad (1.2.17)$$

を m 回微分する。まず、第 1 項はチェーンルールを用いて、

$$\begin{aligned} \left\{ (1 - z^2) \frac{d^2 P}{dz^2} \right\}^{(m)} &= \sum_{k=0}^m \binom{m}{k} (1 - z^2)^{(k)} \left(\frac{d^2 P}{dz^2} \right)^{(m-k)} \\ &= (1 - z^2) \frac{d^{m+2} P}{dz^{m+2}} - 2mz \frac{d^{m+1} P}{dz^{m+1}} - m(m-1) \frac{d^m P}{dz^m}. \end{aligned} \quad (1.2.18)$$

同様に第 2 項は、

$$\begin{aligned} \left\{ -2z \frac{dP}{dz} \right\}^{(m)} &= \sum_{k=0}^m \binom{m}{k} (-2z)^{(k)} \left(\frac{dP}{dz} \right)^{(m-k)} \\ &= -2z \frac{d^{m+1} P}{dz^{m+1}} - 2 \frac{d^m P}{dz^m}. \end{aligned} \quad (1.2.19)$$

第 3 項は、

$$(\lambda P)^{(m)} = \lambda \frac{d^m P}{dz^m} \quad (1.2.20)$$

となるので、各項を足すと、

$$\left\{ (1 - z^2) \frac{d^2 P}{dz^2} - 2z \frac{dP}{dz} + \lambda P \right\}^{(m)} = 0 \quad (1.2.21)$$

$$\iff (1 - z^2) P^{(m+2)} - 2mz P^{(m+1)} - m(m-1) P^{(m)} - 2z P^{(m+1)} - 2 P^{(m)} + \lambda P^{(m)} = 0 \quad (1.2.22)$$

$$\iff (1 - z^2) P^{(m+2)} - 2(m+1)z P^{(m+1)} + (\lambda - m(m+1)) P^{(m)} = 0 \quad (1.2.23)$$

ここで、整理のため、

$$U := \frac{d^m P}{dz^m} \quad (1.2.24)$$

とおくと,

$$(1 - z^2)U'' - 2(m + 1)zU' + (\lambda - m(m + 1))U = 0 \quad (1.2.25)$$

となる. ここで, 命題 1.3 の解を

$$P^m(z) = (1 - z^2)^{\frac{m}{2}}U(z) \quad (1.2.26)$$

と想定し, ルジャンドルの陪微分方程式に代入すると,

$$\begin{aligned} & \frac{d}{dz} \left[(1 - z^2) \frac{dP^m}{dz} \right] - \left(\lambda - \frac{m^2}{1 - z^2} \right) P^m = 0 \\ \Leftrightarrow & (1 - z^2) \frac{d^2 P^m}{dz^2} - 2z \frac{dP^m}{dz} + \left(\lambda - \frac{m^2}{1 - z^2} \right) P^m = 0 \end{aligned} \quad (1.2.27)$$

となり, (1.2.26) を代入すると,

$$(1 - z^2) \frac{d^2}{dz^2} (1 - z^2)^{\frac{m}{2}} U(z) - 2z \frac{d}{dz} (1 - z^2)^{\frac{m}{2}} U(z) + \left(\lambda - \frac{m^2}{1 - z^2} \right) (1 - z^2)^{\frac{m}{2}} U(z) = 0. \quad (1.2.28)$$

まず, 第 1 項は,

$$(1 - z^2) \frac{d^2}{dz^2} (1 - z^2)^{\frac{m}{2}} U(z) = (1 - z^2)^{\frac{m}{2}} \{ (1 - z^2)U'' - 2mzU' + (-m + m(m - 2)z^2(1 - z^2)^{-1})U \} \quad (1.2.29)$$

次に, 第 2 項は,

$$-2z \frac{d}{dz} (1 - z^2)^{\frac{m}{2}} U(z) = (1 - z^2)^{\frac{m}{2}} \{ 2m^2 z^2 (1 - z^2)^{-1} U - 2zU' \} \quad (1.2.30)$$

第 3 項は,

$$\left(\lambda - \frac{m^2}{1 - z^2} \right) (1 - z^2)^{\frac{m}{2}} U(z) = (1 - z^2)^{\frac{m}{2}} \{ \lambda - m^2(1 - z^2)^{-1} \} U \quad (1.2.31)$$

となり, 足し合わせると,

$$(1 - z^2)U'' - 2(m + 1)zU' + (\lambda - m(m + 1))U = 0 \quad (1.2.32)$$

となる. これは, (1.2.25) と一致するので, 命題 1.5 が示される.

§ 2. 球対称な場におけるシュレーディンガー方程式

2.1 球対称な場におけるシュレーディンガー方程式

3次元極座標では、波動関数 $\varphi(\mathbf{r})$ は r, θ, ϕ の3つの変数に依存するため扱いにくい。

定理 2.1 3次元極座標におけるシュレーディンガー方程式の変数分離 3次元極座標におけるシュレーディンガー方程式,

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left\{ \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right\} + V(r) \right] \varphi(\mathbf{r}) = E \varphi(\mathbf{r})$$

を,

$$\varphi(\mathbf{r}) = \varphi(r, \theta, \phi) = R(r) \Theta(\theta) \Phi(\phi)$$

で変数分離すると,

$$\frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} r R(r) + \left\{ \frac{2m}{\hbar^2} (E - V(r)) - \frac{\lambda}{r^2} \right\} R(r) = 0,$$

$$\frac{d^2 \Phi(\phi)}{d\phi^2} + m^2 \Phi(\phi) = 0,$$

$$\frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d\Theta(\theta)}{d\theta} \right) + \left(\lambda - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} \right) \Theta(\theta) = 0$$

の3つの微分方程式が得られる。

球対称な場 $V(\mathbf{r}) = V(r)$ のなかで運動する自由粒子のシュレーディンガー方程式として、命題 1.1 を用いて,

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left\{ \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right\} + V(r) \right] \varphi(\mathbf{r}) = E \varphi(\mathbf{r}) \quad (2.1.1)$$

を採用する。これに、変数分離するために,

$$\varphi(\mathbf{r}) = \varphi(r, \theta, \phi) = R(r) Y(\theta, \phi) \quad (2.1.2)$$

を代入し、両辺に $-2mr^2/\hbar^2$ をかけ、 $R(r)Y(\theta, \phi)$ で割り整理すると,

$$\frac{r}{R} \frac{d^2}{dr^2} R + \frac{2mr^2}{\hbar^2} (E - V(r)) = -\frac{1}{Y(\theta, \phi)} \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial Y(\theta, \phi)}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 Y(\theta, \phi)}{\partial \phi^2} \right] \quad (2.1.3)$$

と変数分離できた。左辺は r のみ、右辺は Y のみに依存するため、両辺とも一定となることがわかる。

よって、定数 λ を用いて整理すると、

$$\text{動径方向： } \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2}(rR(r)) + \left\{ \frac{2m}{\hbar^2}(E - V(r)) - \frac{\lambda}{r^2} \right\} R(r) = 0, \quad (2.1.4)$$

$$\text{角部分： } \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial Y(\theta, \phi)}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 Y(\theta, \phi)}{\partial \phi^2} + \lambda Y(\theta, \phi) = 0 \quad (2.1.5)$$

の2つの微分方程式が得られた。(2.1.5)は、 E や $V(r)$ に無依存なため、どんな中心力ポテンシャルに対しても共通である。

続いて、角部分も同様に、

$$Y(\theta, \phi) = \Theta(\theta)\Phi(\phi) \quad (2.1.6)$$

を(2.1.5)に代入し、両辺に $\sin^2 \theta / \Theta(\theta)\Phi(\phi)$ をかけると、

$$\sin \theta \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d\Theta(\theta)}{d\theta} \right) \frac{1}{\Theta(\theta)} + \lambda \sin^2 \theta = - \frac{1}{\Phi(\phi)} \frac{d^2 \Phi(\phi)}{d\phi^2} \quad (2.1.7)$$

と、変数分離することができ、まゝと同様に両辺が一定なので、定数 m^2 を用いて整理すると、

$$\frac{d^2 \Phi(\phi)}{d\phi^2} + m^2 \Phi(\phi) = 0, \quad (2.1.8)$$

$$\frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) + \left(\lambda - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} \right) \Theta = 0 \quad (2.1.9)$$

と、2つの微分方程式を得ることができる。

2.2 球面調和関数

定理 2.1 で得た微分方程式の解を求めていく。

定理 2.2 (2.1.8) の解は、以下のように表される。

$$\Phi_m(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\phi} \quad (m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots)$$

一周して同じ値を取るため解が一価関数であること、すなわち $\varphi(0) = \varphi(2\pi)$ が要請される。よって、 $e^{im\phi}$ は $e^{2\pi im} = 1$ を満たすので、

$$m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (2.2.1)$$

のときにのみ、上の要請が満たされる。また、

$$\Phi_m(\phi) = A e^{im\phi} \quad (m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots) \quad (2.2.2)$$

とにおいて規格化すると,

$$\int_0^{2\pi} \Phi^* \Phi d\phi = 2\pi A^2 = 1 \quad (2.2.3)$$

より,

$$\Phi_m(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\phi} \quad (m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots) \quad (2.2.4)$$

が (2.1.8) の解となる.

定理 2.3 (2.1.9) の解は, $z = \cos \theta$ を用いて, 以下のように表される.

$$\Theta(\theta) = P^m(z) = (1 - z^2)^{\frac{|m|}{2}} \frac{d^{|m|} P}{dz^{|m|}}.$$

命題 1.5 より,

$$z = \cos \theta, \quad \frac{d}{dz} = -\frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} \quad (2.2.5)$$

と置換すれば, 定理 2.3 は示される.

正の整数 l を用いて, $\lambda = l(l+1)$ とすれば, l は有限の解を持ち, 命題 1.4 より l 次のルジャンドル多項式,

$$P_l(z) = \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l}{dz^l} (z^2 - 1)^l \quad (2.2.6)$$

は, ルジャンドルの微分方程式の有限な解を表しており, $|m| \leq l$ であれば, 物理的に許される解を持つ. l を用いて, 命題 1.5 より,

$$P_l^m(z) = (1 - z^2)^{\frac{|m|}{2}} \frac{d^{|m|} P_l(z)}{dz^{|m|}} \quad (2.2.7)$$

と解が得られる.

さらに, 規格化定数 N_{lm} を用いれば, 定理 2.2 と定理 2.3 より,

$$Y_l^m(\theta, \phi) = N_{lm} P_l^m(\cos \theta) \Phi_m(\phi) \quad (2.2.8)$$

と表せ, この解を球面調和関数と呼ぶ. また, 量子数 l を軌道角運動量量子数, 量子数 m を軌道磁気量子数と呼ぶ.

2.3 角運動量

定理 2.4 極座標における運動量 極座標における運動量は、以下のように表せる。

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right]$$

まず、直交座標での角運動量を極座標に変換することで、

$$\begin{aligned}\hat{L}_x &= -\frac{\hbar}{i} \left(\sin \phi \frac{\partial}{\partial \theta} + \cot \theta \cos \phi \frac{\partial}{\partial \phi} \right), \\ \hat{L}_y &= \frac{\hbar}{i} \left(\cos \phi \frac{\partial}{\partial \theta} - \cot \theta \sin \phi \frac{\partial}{\partial \phi} \right), \\ \hat{L}_z &= \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \phi}\end{aligned}\tag{2.3.1}$$

となり、内積を取れば、定理 2.4 が示される。

ここで、(2.1.5) と定理 2.4 より球面調和関数を用いて、

$$\begin{aligned}\hat{L}^2 Y_l^m(\theta, \phi) &= -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right] Y_l^m(\theta, \phi) \\ &= -\hbar^2 [-\lambda] Y_l^m(\theta, \phi) \\ &= \lambda \hbar^2 Y_l^m(\theta, \phi) \\ &= l(l+1) \hbar^2 Y_l^m(\theta, \phi)\end{aligned}\tag{2.3.2}$$

が得られ、同様に定理 2.2 と (2.3.1) より、

$$\hat{L}_z Y_l^m(\theta, \phi) = \frac{\hbar}{i} N_{lm} P_l^m \frac{\partial}{\partial \phi} \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\phi} \right) = m \hbar Y_l^m(\theta, \phi)\tag{2.3.3}$$

ここで、(2.3.2) と (2.3.3) は、 $Y_l^m(\theta, \phi)$ の角運動量の二乗の固有関数に対して、それぞれ固有値 $l(l+1)\hbar^2$ と $m\hbar$ を持ち、固有関数は常に決まった値を持つ。

2.4 動径方程式

角運動量の二乗は常に決まった値を持つ粒子の定常状態の波動関数は、

$$\varphi(\mathbf{r}) = R_l(r) Y_l^m(\theta, \phi)\tag{2.4.1}$$

で与えられる。

定理 2.5 動径方向のポテンシャル 動径方向のポテンシャルは、次のように与えられる。

$$V_{\text{eff}}(r) = V(r) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2}.$$

定理 2.1 より、動径部分の方程式は (2.4.1) より、

$$\frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} (r R_l) + \left\{ \frac{2m}{\hbar^2} (E - V(r)) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right\} R_l = 0 \quad (2.4.2)$$

ここで、

$$R_l(r) = \frac{\chi_l(r)}{r} \quad (2.4.3)$$

とおくと、(2.4.2) の両辺に $-\hbar^2 r/(2m)$ をかけると、

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \chi_l(r)}{dr^2} + \left[V(r) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} \right] \chi_l(r) = E \chi_l(r) \quad (2.4.4)$$

よって、定理 2.5 が示された。

(2.4.4) は、1 次元運動に対するシュレーディンガー方程式と同じ形をしており、3 次元運動を 1 次元運動に帰着させて解くことができることを意味する。また、定理 2.5 で示したポテンシャルの第 2 項は、遠心力ポテンシャルや障壁ポテンシャルと呼ばれる。

動径方程式は 1 次元シュレーディンガー方程式であるため、固定した l に対する離散固有値は非縮退であるが、角部分の運動を決める l, m のうち、 m が動径方程式には含まれないので、 $|m| \leq l$ の条件のもと $2l+1$ 重に縮退する。

定理 2.6 原点付近における動径運動 原点付近の運動では、以下のように要請される。

$$\chi_l(0) = 0.$$

波動関数が規格化されるためには、球面調和関数は規格化されているため、

$$\begin{aligned} \int_0^\infty d^3r |\varphi(\mathbf{r})|^2 &= \int_0^\infty r^2 dr \int d\Omega |R_l(r) Y_l^m(\theta, \phi)|^2 \\ &= \int_0^\infty r^2 dr |R_l(r)|^2 \\ &= \int_0^\infty dr |\chi_l(r)|^2 = 1 \end{aligned} \quad (2.4.5)$$

を条件にもつ。

次に原点付近での振る舞いを調べるため,

$$|V(r)|r^2 \rightarrow 0 \quad (2.4.6)$$

と仮定する. まず, $l \neq 0$ の時の運動を調べる. 定理 2.5 より,

$$V_{\text{eff}}(r)r^2 = V(r)r^2 + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2m} \quad (2.4.7)$$

となるため,

$$(E - V)\chi_l(r) = -\frac{\hbar^2}{2m}\chi_l'' + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2}\chi_l(r) \simeq 0 \quad (2.4.8)$$

となる. ここに,

$$\chi_l(r) \simeq r^s \quad (2.4.9)$$

を代入すると,

$$s(s-1) = l(l+1) \quad (2.4.10)$$

となり, 解は $s = l+1$ または $s = -l$ となるが, 規格化条件より, $s = -l$ は原点で発散してしまうため, 解として $s = l+1$ のときのみ物理的に許され,

$$\chi_l(0) = 0 \quad (l \neq 0) \quad (2.4.11)$$

が得られる.

次に $l = 0$ のとき, 背理法を用いて証明する. $\chi_0(0) \neq 0$ と仮定する. 計算は省略するが球面調和関数は,

$$Y_0^0 = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \quad (2.4.12)$$

であることを用いると, (2.4.1) は,

$$\varphi(\mathbf{r}) = \frac{c}{r}Y_0^0(\theta, \phi) = \frac{c}{\sqrt{4\pi}r} \quad (2.4.13)$$

となる. 命題 1.2 より,

$$\Delta\varphi(\mathbf{r}) = \Delta\left(\frac{c}{\sqrt{4\pi}r}\right) = \frac{c}{\sqrt{4\pi}}[-4\pi\delta(\mathbf{r})] = -\sqrt{4\pi}c\delta(\mathbf{r}) \quad (2.4.14)$$

となり、ハミルトニアンは、

$$\hat{H}\varphi(\mathbf{r}) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(r) \right] \varphi(\mathbf{r}) = \frac{\hbar^2}{2m}\sqrt{4\pi c}\delta(\mathbf{r}) + V(r)\varphi(\mathbf{r}) \quad (2.4.15)$$

となり、シュレーディンガー方程式の右辺は、

$$E\varphi(\mathbf{r}) = E \frac{c}{\sqrt{4\pi r}} \quad (2.4.16)$$

であり、左辺のみデルタ関数含んでしまうため、

$$\chi_0(0) = 0 \quad (2.4.17)$$

となる。

定理 2.7 中心力ポテンシャル $V(r)$ のなかの質量 m の粒子が、一般の中心力ポテンシャルでは、与えられた角運動量が増大すれば、許される最低エネルギー固有値 E_l^0 も大きくなる。

(2.4.4) より、

$$\hat{H}_l = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + \left[V(r) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} \right] \quad (2.4.18)$$

とおき、最低固有値を E_l^0 、その固有関数を χ_l^0 とおくと、

$$\hat{H}_{l+1} - \hat{H}_l = \frac{(l+1)\hbar^2}{mr^2} \quad (2.4.19)$$

となるので、

$$\begin{aligned} E_{l+1}^0 &= \int \chi_{l+1}^{0*} \hat{H}_{l+1} \chi_{l+1}^0 d^3r \\ &= \int \chi_{l+1}^{0*} \hat{H}_l \chi_{l+1}^0 d^3r + \int \frac{(l+1)\hbar^2}{mr^2} \chi_{l+1}^{0*} \chi_{l+1}^0 d^3r \end{aligned} \quad (2.4.20)$$

χ_{l+1}^0 を完全系 $\{\chi_l^k\}$ で展開すると、

$$\chi_{l+1}^0 = \sum_k C_k \chi_l^k, \quad \sum_k |C_k|^2 = 1 \quad (2.4.21)$$

となり、(2.4.18) の第 1 項に代入すると、

$$\int \chi_{l+1}^{0*} \hat{H}_l \chi_{l+1}^0 d^3r = \sum_k |C_k|^2 E_l^k \quad (2.4.22)$$

より,

$$\sum_k |C_k|^2 E_l^k - E_l^0 = \sum_k |C_k|^2 E_l^k - E_l^0 \sum_k |C_k|^2 = \sum_k |C_k|^2 (E_l^k - E_l^0) > 0 \quad (2.4.23)$$

となるので,

$$\int \chi_{l+1}^{0*} \hat{H}_l \chi_{l+1}^0 d^3r > E_l^0 \quad (2.4.24)$$

が得られる. よって, (2.4.20) の第 2 項 > 0 より,

$$E_{l+1}^0 > E_l^0 \quad (2.4.25)$$

となるので,

$$E_0^0 < E_1^0 < E_2^0 < \cdots < E_l^0 < E_{l+1}^0 < \cdots$$

が示される.

l のとる値の状態にはそれぞれ, $l = 0$ から順に, s, p, d, f, g, h, $\cdots$ とした記号で表される.

定理 2.7 より, 中心力場での粒子の基底状態は s であることがわかる.

§ 3. 2 体問題

3.1 古典力学における重心運動の分離

質量 m_1, m_2 , 位置 r_1, r_2 の2つの粒子を考える.

定理 3.1 2つの粒子のラグランジアン 2つの粒子のラグランジアンは, 重心座標 R と相対座標 r を用いて以下のように表される.

$$L = \frac{1}{2}(m_1 + m_2)\dot{R}^2 + \frac{1}{2}\mu\dot{r}^2 - V(r).$$

まず2つの粒子のラグランジアンは,

$$L = T - V = \frac{1}{2}m_1\dot{r}_1^2 + \frac{1}{2}m_2\dot{r}_2^2 - V(|r_1 - r_2|) \quad (3.1.1)$$

で表され,

$$\text{重心座標 } R = \frac{m_1 r_1 + m_2 r_2}{m_1 + m_2}, \quad \text{相対座標 } r = r_1 - r_2 \quad (3.1.2)$$

とおくと,

$$\begin{aligned} L &= \frac{1}{2}m_1 \left(\dot{R} + \frac{m_2}{m_1 + m_2} \dot{r} \right)^2 + \frac{1}{2}m_2 \left(\dot{R} - \frac{m_1}{m_1 + m_2} \dot{r} \right)^2 - V(r) \\ &= \frac{1}{2}(m_1 + m_2)\dot{R}^2 + \frac{1}{2}\frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}\dot{r}^2 - V(r) \end{aligned} \quad (3.1.3)$$

定理 3.1 が示され,

$$\text{全質量 } M = m_1 + m_2, \quad \text{換算質量 } \mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \quad (3.1.4)$$

を用いると,

$$L = \frac{1}{2}M\dot{R}^2 + \frac{1}{2}\mu\dot{r}^2 - V(r) \quad (3.1.5)$$

となる.

定理 3.2 古典力学における分離された重心運動のハミルトニアン 全運動量 P と相対運動量 p を用いて, ハミルトニアンは次のようになる.

$$H = \frac{P^2}{2M} + \frac{p^2}{2\mu} + V(r).$$

それぞれの粒子の運動量,

$$\mathbf{p}_1 = m_1 \dot{\mathbf{r}}_1, \quad \mathbf{p}_2 = m_2 \dot{\mathbf{r}}_2 \quad (3.1.6)$$

より, (3.1.2) を用いて, 分離された重心運動の運動量は,

$$\mathbf{P} = M \dot{\mathbf{R}} = m_1 \dot{\mathbf{r}}_1 + m_2 \dot{\mathbf{r}}_2 = \mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2, \quad \mathbf{p} = \mu \dot{\mathbf{r}} = \frac{m_2 \mathbf{p}_1 - m_1 \mathbf{p}_2}{m_1 + m_2} \quad (3.1.7)$$

となり, $\mathbf{P}$ を全運動量, $\mathbf{p}$ を相対運動量という. ハミルトニアンはこれらを用いて,

$$H = \frac{\mathbf{P}^2}{2M} + \frac{\mathbf{p}^2}{2\mu} + V(r) \quad (3.1.8)$$

と表される. と正準運動量は,

$$\dot{\mathbf{P}} = -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{R}} = 0, \quad \dot{\mathbf{p}} = -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{r}} = -\nabla V(r) \quad (3.1.9)$$

従って, 重心運動は一様な直線運動, 相対運動はポテンシャル $V(r)$ 内における質量 μ の粒子の運動をしていることが分かる.

3.2 量子系における重心運動の分離

前節での議論を量子論に置き換える. 2 つの粒子の位置と運動量を表す演算子 $\hat{r}_1, \hat{p}_1, \hat{r}_2, \hat{p}_2$ は,

$$[\hat{r}_{1i}, \hat{p}_{1j}] = i\hbar\delta_{ij}, \quad [\hat{r}_{2i}, \hat{p}_{2j}] = i\hbar\delta_{ij} \quad (i, j = 1, 2, 3) \quad (3.2.1)$$

となるので, (3.1.2) と (3.1.7) より,

$$[\hat{r}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\delta_{ij}, \quad [\hat{R}_i, \hat{P}_j] = i\hbar\delta_{ij} \quad (i, j = 1, 2, 3) \quad (3.2.2)$$

となる交換が得られる. ハミルトニアンも同様に,

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}_1^2}{2m_1} + \frac{\hat{\mathbf{p}}_2^2}{2m_2} + V(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|) \quad (3.2.3)$$

と表せ, 定理 3.2 と同様に,

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{2M} + \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2\mu} + V(r) \quad (3.2.4)$$

と表せる. ここで,

$$\text{重心 } \hat{H}_{CM} = \frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{2M}, \quad \text{相対運動 } \hat{H}_{rel} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2\mu} + V(r) \quad (3.2.5)$$

と分離すると,

$$\hat{H} = \hat{H}_{CM} + \hat{H}_{rel} \quad (3.2.6)$$

となり,

$$[\hat{H}_{CM}, \hat{H}_{rel}] = 0 \quad (3.2.7)$$

より, $\hat{H}_{CM}, \hat{H}_{rel}$ は $\hat{H}$ と交換する.

定理 3.3 量子系における分離された重心運動のシュレーディンガー方程式 量子系における分離された重心運動のシュレーディンガー方程式は以下のように表される.

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2M} \Delta_R \varphi_{CM}(\mathbf{R}) &= E_{CM} \varphi_{CM}(\mathbf{R}), \\ \left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta + V(r) \right] \varphi(\mathbf{r}) &= E_{rel} \varphi(\mathbf{r}). \end{aligned}$$

シュレーディンガー方程式,

$$\hat{H}\Phi = E\Phi \quad (3.2.8)$$

の解を,

$$\Phi = \varphi_{CM}(\mathbf{R})\varphi(\mathbf{r}) \quad (3.2.9)$$

とおくと,

$$\begin{aligned} \hat{H}\Phi &= (\hat{H}_{CM} + \hat{H}_{rel})\varphi_{CM}(\mathbf{R})\varphi(\mathbf{r}) \\ &= (\hat{H}_{CM}\varphi_{CM}(\mathbf{R}))\varphi(\mathbf{r}) + \varphi_{CM}(\mathbf{R})(\hat{H}_{rel}\varphi(\mathbf{r})) \\ &= E\varphi_{CM}(\mathbf{R})\varphi(\mathbf{r}) \end{aligned} \quad (3.2.10)$$

となるので,

$$\frac{\hat{H}_{CM}\varphi_{CM}(\mathbf{R})}{\varphi_{CM}(\mathbf{R})} + \frac{\hat{H}_{rel}\varphi(\mathbf{r})}{\varphi(\mathbf{r})} = E = E_{CM} + E_{rel} \quad (3.2.11)$$

とすれば変数分離することができ,

$$\hat{H}_{CM}\varphi_{CM}(\mathbf{R}) = E_{CM}\varphi_{CM}(\mathbf{R}), \quad \hat{H}_{rel}\varphi(\mathbf{r}) = E_{rel}\varphi(\mathbf{r}) \quad (3.2.12)$$

となるので, R 座標に関するラプラシアン Δ_R を用いると, (3.2.5) より,

$$\hat{H}_{CM}\varphi_{CM}(\mathbf{R}) = -\frac{\hbar^2}{2M}\Delta_R\varphi_{CM}(\mathbf{R}) = E_{CM}\varphi_{CM}(\mathbf{R}), \quad \hat{H}_{rel}\varphi(\mathbf{r}) = \left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta + V(r)\right]\varphi(\mathbf{r}) = E_{rel}\varphi(\mathbf{r}) \quad (3.2.13)$$

が得られる. よって, 2 体問題をあつかうとき, 1 粒子の問題に帰着することができる.