剛体球の自由回転運動のシュレディンガー方程式における力学的対称性（その 1）

adhara*

2017 年 4 月 5 日

概要

本記事では剛体球の自由回転運動のシュレディンガー方程式における力学的対称性について紹介する。剛体球の自由回転運動についても水素原子同様に 4 次元空間の回転対称性が備わっている。

* Twitter @adhara_mathphys

目次

1　剛体球の自由回転運動の古典力学

剛体の力学によれば剛体には直交する 3 つの慣性主軸が存在し、それぞれに対応した主慣性モーメントが存在する。特に剛体球についてはこれらの主慣性モーメントは一致する。とりあえずは球とは限らない剛体を考える。直交する慣性主軸 A, B, C を選び、それぞれの主慣性モーメントを I_a, I_b, I_c とする。

ここで剛体とともに動く座標系 ABC を考える。この座標系を用いて描く速度が $\boldsymbol{\omega} = (\omega_a, \omega_b, \omega_c)$ と表されるとすると、自由回転する剛体球のエネルギーは

$$H = \frac{\sum_{i=a,b,c} I_i \omega_i^2}{2} \tag{1}$$

となる。また座標系 ABC 表示での角運動量を $\boldsymbol{L} = (L_a, L_b, L_c)$ とすると、

$$L_i = I_i \omega_i \tag{2}$$

という関係が成立する。これを用いるとエネルギーは

$$H = \frac{\boldsymbol{\omega} \cdot \boldsymbol{L}}{2} = \sum_{i=a,b,c} \frac{L_i^2}{2I_i} \tag{3}$$

とも表される。

ここで、実験室座標系 xyz を考える。ただし原点は座標系 ABC と一致させる。この座標系を結びつけるオイラー角を (ϕ, θ, ψ) とする。（ランダウ力学と同じ定義）このとき、

$$\omega_a = \dot{\phi} \sin\theta \sin\psi + \dot{\theta} \cos\psi \tag{4}$$
$$\omega_b = \dot{\phi} \sin\theta \cos\psi - \dot{\theta} \sin\psi \tag{5}$$
$$\omega_c = \dot{\phi} \cos\theta + \dot{\psi} \tag{6}$$
$$L_a = I_a(\dot{\phi} \sin\theta \sin\psi + \dot{\theta} \cos\psi) \tag{7}$$
$$L_b = I_b(\dot{\phi} \sin\theta \cos\psi - \dot{\theta} \sin\psi) \tag{8}$$
$$L_c = I_c(\dot{\phi} \cos\theta + \dot{\psi}) \tag{9}$$

のようにオイラー角を用いて座標 ABC における角速度や角運動量を書くことができる。

自由運動のラグランジアン $L(\phi,\theta,\psi)$ はエネルギー H と同じであることに注意すると、各オイラー角と共役な正準変数（一般化運動量）が

$$p_\phi = \frac{\partial L}{\partial \phi} = L_a \sin\theta \sin\psi + L_b \sin\theta \cos\psi + L_c \cos\theta \tag{10}$$

$$p_\theta = \frac{\partial L}{\partial \theta} = L_a \cos\psi - L_b \sin\psi \tag{11}$$

$$p_\psi = \frac{\partial L}{\partial \psi} = L_c \tag{12}$$

のように求まる。

逆に一般化運動量を用いて角運動量を表示することもできる。すなわち、

$$L_a = p_\phi \frac{\sin\psi}{\sin\theta} + p_\theta \cos\psi - p_\psi \frac{\cos\theta}{\sin\theta} \sin\psi \tag{13}$$

$$L_b = p_\phi \frac{\cos\psi}{\sin\theta} - p_\theta \sin\psi - p_\psi \frac{\cos\theta}{\sin\theta} \cos\psi \tag{14}$$

$$L_c = p_\psi \tag{15}$$

となる。

2　剛体球の自由回転運動の量子力学

正準量子化により、シュレディンガー方程式を導くことができる。すなわち、

$$p_j = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial j} \tag{16}$$

とすると、シュレディンガー方程式

$$\hat{H}(\phi,\theta,\psi)\Psi(\phi,\theta,\psi) = E\Psi(\phi,\theta,\psi) \tag{17}$$

によって剛体が形成する回転準位のスペクトルを求めることができる。ハミルトニアン $\hat{H}$ は演算子となっており、先のエネルギーとして出てきた H の中で一般化運動量を正準量子化に従って微分演算子に置き換えたものである。

ここで、$I_a = I_b = I$ とすると、シュレディンガー方程式は

$$\frac{\hat{L}^2}{2I}\Psi(\phi,\theta,\psi) = E\Psi(\phi,\theta,\psi) \tag{18}$$

となる。（角運動量についても演算子となる）

3　剛体球の自由回転運動における $su(2)$ 対称性

角運動量演算子につける ^ は省略する。まず、$L_1 = -L_a, L_2 = -L_b, L_3 = -L_c$ とおく。すなわち、

$$L_1 = -\frac{\sin\psi}{\sin\theta}\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\phi} - \cos\psi\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{\cos\theta}{\sin\theta}\sin\psi\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\psi} \tag{19}$$

$$L_2 = -\frac{\cos\psi}{\sin\theta}\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\phi} + \sin\psi\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{\cos\theta}{\sin\theta}\cos\psi\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\psi} \tag{20}$$

$$L_3 = -\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\psi} \tag{21}$$

このとき、交換関係を計算すると

$$[L_i, L_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}L_k \tag{22}$$

のようにまとめることができる。したがって、これらは $su(2)$ 代数の基底となっていることがわかる。

角運動量演算子の自乗 L^2 を計算すると、

$$\begin{aligned} L^2 &= L_1^2 + L_2^2 + L_3^2 \\ &= -\hbar^2\left(\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2} + \frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\psi^2} - 2\frac{\cos\theta}{\sin^2\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\frac{\partial}{\partial\psi} + \frac{\cos\theta}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\right) \end{aligned} \tag{23}$$

となる。ここで $su(2)$ 代数の基本的な知識より L^2 はカシミール演算子であり、L_1, L_2, L_3 の全てと可換である。すなわち、ハミルトニアンは角運動量の作用に対して不変であることがわかる。

4　剛体球の自由回転運動における隠れた対称性

$su(2)$ 以外に対称性はないのだろうか？ 実は存在する。L^2 の形を見ると、ϕ と ψ に関して対称の形をしていることがわかる。このことから、各 L_i に対して ϕ と ψ の

役割を入れ替えたものについても L^2 と可換であることがわかる。すなわち、

$$K_1 = -\frac{\sin\phi}{\sin\theta}\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\psi} - \cos\phi\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{\cos\theta}{\sin\theta}\sin\phi\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\phi} \tag{24}$$

$$K_2 = -\frac{\cos\phi}{\sin\theta}\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\psi} + \sin\phi\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{\cos\theta}{\sin\theta}\cos\phi\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\phi} \tag{25}$$

$$K_3 = -\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\phi} \tag{26}$$

とすると、これらは L^2 と可換である。また L_i と線型独立であることもわかる。

さらに ϕ と ψ を入れ替えただけなので、

$$[K_i, K_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}K_k \tag{27}$$

や

$$L^2 = K^2 \tag{28}$$

が成立することもわかる。したがって、K_i がなすリー代数も $su(2)$ に同型である。

そして

$$[L_i, K_j] = 0 \tag{29}$$

であることが計算によりわかる。

L_i と K_i は独立に $su(2)$ 代数となっており、剛体球の自由運動は $su(2) \oplus su(2) \simeq so(4)$ というリー代数で記述される対称性を持つことがわかる。

5 剛体球の回転準位

5.1 $so(4)$ 代数の既約表現

階数が 2 なので $so(4)$ 代数では独立なカシミール演算子（各基底と交換可能な演算子）が二つ存在する。例えば L^2 と K^2 を選べる。したがって、$so(4)$ 代数の既約表現を考えたときにその表現空間では L^2 や K^2 はスカラーとなる。さらに、その表現空間は L^2 の既約部分空間と K^2 の既約部分空間の直積となる。

$\boldsymbol{L}$ の成分を基底とする $su(2)$ 代数の既約部分空間は、非負の整数または半整数 l_a で指定され、

$$\{|l_a, m_a\rangle_a | m_a = -l_a, -l_a+1, \cdots, l_a-1, l_a\}$$

のように表される。ただし、$|l_a, m_a\rangle_a$ は L^2, L_3 の同時固有状態であり、

$$L^2|l_a, m_a\rangle_a = l_a(l_a+1)\hbar^2|l_a, m_a\rangle_a \tag{30}$$
$$L_3|l_a, m_a\rangle_a = m_a\hbar|l_a, m_a\rangle_a \tag{31}$$

である。

同様に $\boldsymbol{K}$ の成分を基底とする $su(2)$ 代数の既約部分空間は、非負の整数または半整数 l_b で指定され、

$$\{|l_b, m_b\rangle_b | m_a = -l_b - l_b + 1, \cdots, l_b - 1, l_b\}$$

のように表される。ただし、$|l_b, m_b\rangle_b$ は K^2, K_3 の同時固有状態であり、

$$K^2|l_b, m_b\rangle_b = l_b(l_b+1)\hbar^2|l_b, m_b\rangle_b \tag{32}$$
$$K_3|l_b, m_b\rangle_b = m_b\hbar|l_b, m_b\rangle_b \tag{33}$$

である。

したがって、l_a, l_b を指定したときに、L^2 や K^2 の各固有状態の直積の形で表される $(2l_a+1)(2l_b+1)$ 個の状態からなるヒルベルト空間

$$\begin{aligned}&\{|l_a, m_a\rangle_a |l_b, m_b\rangle_b |\\ &m_a = -l_a, -l_a+1, \cdots, l_a-1, l_a, m_b = -l_b, -l_b+1, \cdots, l_b-1, l_b\}\end{aligned}$$

が $so(4)$ 代数の一つの既約表現に属する。

5.2　回転準位

今回は $L^2 = K^2$ という条件が付け加えられるので、$l_a = l_b$ となる既約部分空間が許される。また、L^2 は角運動量演算子であり、$l_a = l_b = l$ としては整数値が許される。

したがって、縮重度は l を非負整数として $(2l+1)^2$ となる。量子数 l にこのときエネルギーは

$$E_l = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2I} \tag{34}$$

となる。