水素様原子における量子力学版 Laplace-Runge-Lenz ベクトル（その１）

adhara*

2016 年 12 月 23 日

1　ハミルトニアン

（非相対論的）水素様原子に対するシュレディンガー方程式、

$$\begin{aligned} H\Psi &= \left[-\frac{\hbar^2}{2m_e}\nabla^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\frac{Z}{r} \right]\Psi \\ &= \left[\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m_e} - \frac{\kappa}{r} \right]\Psi \\ &= E\Psi \end{aligned} \tag{1}$$

* Twitter @adhara_mathphys

について考える。ここで、Z は原子の価数である。また $r = |\boldsymbol{x}|$ のように、動径をあらわすときは r を、位置を表すときは $\boldsymbol{x}$ で使い分けるものとする。また、以下に出てくるガウス記号は x, y, z についての和とする。

2　量子力学版 Laplace-Runge-Lenz ベクトルの導入

量子力学版 Laplace-Runge-Lenz ベクトルは

$$\boldsymbol{M} = \frac{1}{2m_e}\left(\boldsymbol{p} \times \boldsymbol{L} - \boldsymbol{L} \times \boldsymbol{p}\right) - \frac{\kappa}{r}\boldsymbol{x} \tag{2}$$

で定義される。

このベクトルはエルミート演算子であることが、

$$\begin{aligned}
(\boldsymbol{p} \times \boldsymbol{L})^\dagger &= \sum_{ijk} \left(p_i L_j \boldsymbol{e}_k \epsilon_{ijk}\right)^\dagger \\
&= \sum_{ijk} L_j p_i \boldsymbol{e}_k \epsilon_{ijk} \\
&= \sum_{ijk} L_i p_j \boldsymbol{e}_k \epsilon_{jik} \\
&= -\sum_{ijk} L_i p_j \boldsymbol{e}_k \epsilon_{ijk} \\
&= -\boldsymbol{L} \times \boldsymbol{p}
\end{aligned} \tag{3}$$

から示せる。

3　Laplace-Runge-Lenz ベクトルが保存量であること

ハミルトニアンとベクトルが交換可能であること、

$$[\boldsymbol{M}, H] = 0 \tag{4}$$

を示す。準備として、$\boldsymbol{p} \times \boldsymbol{L}$ 等を x_i, p_i で陽に表示することを試みる。

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{p} \times \boldsymbol{L} &= \sum_{ijk} p_i L_j \boldsymbol{e}_k \epsilon_{ijk} \\
&= \sum_{mn} \sum_{ijk} p_i x_m p_n \boldsymbol{e}_k \epsilon_{mnj} \epsilon_{ijk} \\
&= \sum_{mn} \sum_{ijk} p_i x_m p_n \boldsymbol{e}_k \epsilon_{njm} \epsilon_{ijk} \\
&= \sum_{mn} \sum_{ijk} p_i x_m p_n \boldsymbol{e}_k (\epsilon_{ijk})^2 (\delta_{in}\delta_{km} - \delta_{im}\delta_{kn}) \\
&= \sum_{ijk} p_i (x_k p_i - x_i p_k) \boldsymbol{e}_k (\epsilon_{ijk})^2 \\
&= \sum_{ijk} (x_k p_i^2 - x_i p_i p_k + i\hbar p_k) \boldsymbol{e}_k (\epsilon_{ijk})^2 \qquad (5) \\
\boldsymbol{L} \times \boldsymbol{p} &= \sum_{ijk} L_i p_j \boldsymbol{e}_k \epsilon_{ijk} \\
&= \sum_{ijk} (x_j p_j p_k - x_k p_j^2) \boldsymbol{e}_k (\epsilon_{ijk})^2 \qquad (6)
\end{aligned}
$$

であることから、

$$
\begin{aligned}
&\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{L}-\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{p} \\
&=\sum_{ijk}\left[x_k(p_i^2+p_j^2)-(x_ip_i+x_jp_j)p_k+i\hbar p_k\right]\boldsymbol{e}_k(\epsilon_{ijk})^2 \\
&=\sum_{ijk}\left[x_k(\boldsymbol{p}^2-p_k^2)-(\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{p}-x_kp_k)p_k+i\hbar p_k\right]\boldsymbol{e}_k(\epsilon_{ijk})^2 \\
&=\sum_{ijk}\left[x_k\boldsymbol{p}^2-(\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{p})p_k+i\hbar p_k\right]\boldsymbol{e}_k(\epsilon_{ijk})^2
\end{aligned}
\tag{7}
$$

のように書き換えることが出来る。

したがって、

$$
\begin{aligned}
[\boldsymbol{M},H]=&\frac{1}{(2m_e)^2}\left[\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{L}-\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{p},\boldsymbol{p}^2\right] \\
&+\kappa\left[-\frac{\boldsymbol{x}}{r},\boldsymbol{p}^2\right] \\
&+\kappa\left[\boldsymbol{p}\times L-\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{p},-\frac{\boldsymbol{x}}{r}\right]
\end{aligned}
\tag{8}
$$

となる。

式 8 第一項は、

$$
\begin{aligned}
&\frac{1}{(2m_e)^2}\left[\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{L}-\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{p},\boldsymbol{p}^2\right] \\
&=\frac{1}{(2m_e)^2}\sum_{ijk}(\epsilon_{ijk})^2\left\{[x_k\boldsymbol{p}^2,\boldsymbol{p}^2]-[(\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{p})p_k,\boldsymbol{p}^2]\right\}\boldsymbol{e}_k \\
&=\frac{1}{(2m_e)^2}\sum_{ijk}(\epsilon_{ijk})^2\left\{-\frac{2\hbar}{i}p_k\boldsymbol{p}^2+\frac{2\hbar}{i}p_k\boldsymbol{p}^2\right\}\boldsymbol{e}_k \\
&=0
\end{aligned} \tag{9}
$$

、式 8 第二項は、

$$
\begin{aligned}
&\kappa\left[-\frac{\boldsymbol{x}}{r},\boldsymbol{p}^2\right] \\
&=\kappa\left[\boldsymbol{p}^2,\frac{\boldsymbol{x}}{r}\right] \\
&=\kappa\sum_i(-\hbar^2)\left\{\partial_i^2\left(\frac{\boldsymbol{x}}{r}\right)+2\partial_i\left(\frac{\boldsymbol{x}}{r}\right)\right\} \\
&=-\hbar^2\kappa\left(2\frac{\boldsymbol{\partial}}{r}-\frac{2\boldsymbol{x}}{r^3}(\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{\partial})-\frac{2\boldsymbol{x}}{r^3}\right) \\
&=2\kappa\frac{\hbar}{i}\left(\frac{\boldsymbol{p}}{r}-\frac{\boldsymbol{x}}{r^3}(\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{p})\right)+2\kappa\hbar^2\frac{\boldsymbol{x}}{r^3}
\end{aligned} \tag{10}
$$

、式 8 第三項は、

$$
\begin{aligned}
&\kappa\left[\boldsymbol{p}\times L-\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{p},-\frac{\boldsymbol{x}}{r}\right]\\
&=\sum_{ijk}(\epsilon_{ijk})^2\left\{-\left[x_k\boldsymbol{p}^2,\frac{1}{r}\right]+\left[(\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{p})p_k,\frac{1}{r}\right]-i\hbar\left[p_k,\frac{1}{r}\right]\right\}\boldsymbol{e}_k\\
&=2\left\{-\left[x_k\boldsymbol{p}^2,\frac{1}{r}\right]+\left[(\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{p})p_k,\frac{1}{r}\right]-i\hbar\left[p_k,\frac{1}{r}\right]\right\}\boldsymbol{e}_k \qquad (11)
\end{aligned}
$$

となるが、

$$
\begin{aligned}
\left[x_k\boldsymbol{p}^2,\frac{1}{r}\right]&=x_k\left[x\boldsymbol{p}^2,\frac{1}{r}\right]\\
&=x_k\frac{2\hbar^2}{r^2}\partial_r\\
&=x_k\frac{2\hbar^2}{r^3}\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{\partial}\\
&=-2\frac{\hbar}{i}\frac{x_k}{r^3}\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{p} \qquad (12)
\end{aligned}
$$

や

$$
\begin{aligned}
\left[p_k,\frac{1}{r}\right]&=\frac{\hbar}{i}\partial_k\left(\frac{1}{r}\right)\\
&=-\frac{\hbar}{i}\frac{x_k}{r^3} \qquad (13)
\end{aligned}
$$

や

$$
\begin{aligned}
&\left[(\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{p})p_k, \frac{1}{r}\right] \\
&= \left[(\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{p})p_k\frac{1}{r}\right] + \left[(\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{p})\frac{1}{r}\right]p_k + \left[p_k\frac{1}{r}\right](\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{p}) \\
&= -\frac{\hbar}{i}\frac{x_k}{r^3}(\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{p}) - \frac{\hbar}{i}\frac{p_k}{r} - 2\hbar^2\frac{x_k}{r^3}
\end{aligned}
\tag{14}
$$

より、

$$
\begin{aligned}
&\kappa\left[\boldsymbol{p}\times L - \boldsymbol{L}\times\boldsymbol{p}, -\frac{\boldsymbol{x}}{r}\right] \\
&= -2\kappa\frac{\hbar}{i}\left(\frac{\boldsymbol{p}}{r} - \frac{\boldsymbol{x}}{r^3}(\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{p})\right) - 2\kappa\hbar^2\frac{\boldsymbol{x}}{r^3}
\end{aligned}
\tag{15}
$$

となる。

　したがって、

$$
[\boldsymbol{M}, H] = 0 \tag{16}
$$

となる。