水素様原子における量子力学版 Laplace-Runge-Lenz ベクトル（その２）

adhara*

2016 年 12 月 23 日

■おさらい

　ハミルトニアン

$$H = -\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m_e} - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m_e} - \frac{\kappa}{r} \tag{1}$$

に対する量子力学版 Laplace-Runge-Lenz ベクトルは

$$\begin{aligned}\boldsymbol{M} &= \frac{1}{2m_e}(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{L} - \boldsymbol{L}\times\boldsymbol{p}) - \frac{\kappa}{r}\boldsymbol{x} \\ &= \frac{1}{m_e}\left(\boldsymbol{x}\boldsymbol{p}^2 - (\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{p})\boldsymbol{p} - \frac{\hbar}{i}\boldsymbol{p}\right) - \frac{\kappa}{r}\boldsymbol{x}\end{aligned} \tag{2}$$

* Twitter @adhara_mathphys

で与えられる。（$|\boldsymbol{x}| = r$）

■$\boldsymbol{M} \cdot \boldsymbol{L} = \boldsymbol{L} \cdot \boldsymbol{M} = 0$ であること

まず、

$$
\begin{aligned}
&\boldsymbol{L} \cdot \left(\boldsymbol{x}\boldsymbol{p}^2 - (\boldsymbol{x} \cdot \boldsymbol{p})\boldsymbol{p} - \frac{\hbar}{i}\boldsymbol{p} \right) \\
&= \sum_{ijk} \epsilon_{ijk} x_i p_j \left(x_k \boldsymbol{p}^2 - (\boldsymbol{x} \cdot \boldsymbol{p}) p_k - \frac{\hbar}{i} p_k \right) \\
&= \sum_{ijk} \epsilon_{ijk} \left(x_i x_k p_j \boldsymbol{p}^2 - x_i (\boldsymbol{x} \cdot \boldsymbol{p}) p_j p_k - \frac{\hbar}{i} x_i p_j p_k - \frac{\hbar}{i} x_i p_j p_k \right) \\
&= 0
\end{aligned} \tag{3}
$$

が示せる。また、

$$
\boldsymbol{L} \cdot \frac{\boldsymbol{x}}{r} = \sum_{ijk} \epsilon_{ijk} x_i p_j \frac{x_k}{r} = \sum_{ijk} \epsilon_{ijk} x_i x_k p_j \frac{1}{r} = 0 \tag{4}
$$

や

$$
\boldsymbol{x} \cdot \boldsymbol{L} = \boldsymbol{x} \cdot (\boldsymbol{x} \times \boldsymbol{p}) = 0 \tag{5}
$$

や

$$
\begin{aligned}
&\left(\boldsymbol{x}\boldsymbol{p}^2-(\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{p})\boldsymbol{p}-\frac{\hbar}{i}\boldsymbol{p}\right)\cdot\boldsymbol{L}\\
&=\sum_{ijk}\epsilon_{ijk}\left(x_k\boldsymbol{p}^2-(\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{p})p_k-\frac{\hbar}{i}p_k\right)x_ip_j\\
&=\sum_{ijk}\epsilon_{ijk}\left(x_kx_ip_j\boldsymbol{p}^2+2\frac{\hbar}{i}x_kp_ip_j-x_i(\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{p})p_kp_j-2\frac{\hbar}{i}x_ip_kp_j\right)x_ip_j\\
&=0 \qquad (6)
\end{aligned}
$$

が示せる。これらをを用いれば

$$\boldsymbol{M}\cdot\boldsymbol{L}=\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{M}=0 \qquad (7)$$

を示せる。

■$\boldsymbol{M}^2$ について

まず、

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{M}^2=&\frac{1}{4m_e^2}(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{L}-\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{p})^2-\frac{\kappa}{2m_e}(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{L}-\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{p})\cdot\frac{\boldsymbol{x}}{r}\\
&-\frac{\kappa}{2m_e}\frac{\boldsymbol{x}}{r}\cdot(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{L}-\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{p})+\kappa^2 \qquad (8)
\end{aligned}
$$

となる。式 8 右辺第一項については、

$$
\begin{aligned}
&(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{L}-\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{p})^2 \\
&=(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{L}-\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{p})\cdot\left(\boldsymbol{x}\boldsymbol{p}^2-(\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{p})\boldsymbol{p}-\frac{\hbar}{i}\boldsymbol{p}\right) \\
&+\left(\boldsymbol{x}\boldsymbol{p}^2-(\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{p})\boldsymbol{p}-\frac{\hbar}{i}\boldsymbol{p}\right)\cdot(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{L}-\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{p}) \\
&=(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{L}-\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{p})\cdot\boldsymbol{x}\boldsymbol{p}^2 \\
&+\boldsymbol{x}\boldsymbol{p}^2\cdot(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{L}-\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{p}) \\
&+(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{L}-\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{p})\cdot\left(-(\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{p})\boldsymbol{p}-\frac{\hbar}{i}\boldsymbol{p}\right) \\
&+\left(-(\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{p})\boldsymbol{p}-\frac{\hbar}{i}\boldsymbol{p}\right)\cdot(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{L}-\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{p})
\end{aligned}
\tag{9}
$$

となるが、

$$
(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{L}-\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{p})\cdot\left(-(\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{p})\boldsymbol{p}-\frac{\hbar}{i}\boldsymbol{p}\right)=2\left(-\frac{\hbar}{i}(\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{p})+\hbar^2\boldsymbol{p}^2\right)
$$

と

$$
\left(-(\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{p})\boldsymbol{p}-\frac{\hbar}{i}\boldsymbol{p}\right)\cdot(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{L}-\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{p})=2\left(\frac{\hbar}{i}(\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{p})-2\hbar^2\boldsymbol{p}^2\right)
$$

より、

$$
\begin{aligned}
(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{L}-\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{p})^2 &=(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{L}-\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{p})\cdot\boldsymbol{x}\boldsymbol{p}^2 \\
&+\boldsymbol{x}\boldsymbol{p}^2\cdot(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{L}-\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{p}) \\
&-2\hbar^2\boldsymbol{p}^2
\end{aligned}
\tag{10}
$$

となる。

　したがって、

$$\begin{aligned}\boldsymbol{M}^2 = &\frac{1}{2m_e}(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{L}-\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{p})\cdot\boldsymbol{x}H \\ &+\frac{1}{2m_e}\boldsymbol{x}\cdot H(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{L}-\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{p})-\frac{\hbar^2\boldsymbol{p}^2}{2m_e^2}+\kappa^2\end{aligned} \tag{11}$$

となる。

　ここで、

$$[H,\boldsymbol{p}]=\frac{\hbar}{i}\left(\frac{\kappa}{r}\right)=-\frac{\hbar}{i}\frac{\kappa\boldsymbol{x}}{r^3} \tag{12}$$

を用いると、

$$H(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{L})=(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{L})H-\frac{\hbar}{i}\frac{\kappa}{r^3}\boldsymbol{x}\times\boldsymbol{L} \tag{13}$$

$$\begin{aligned}H(\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{p})&=(\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{p})H-\frac{\hbar}{i}\boldsymbol{L}\times\frac{\kappa}{r^3}\boldsymbol{x} \\ &=(\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{p})H-\frac{\hbar}{i}\frac{\kappa}{r^3}\boldsymbol{x}\times\boldsymbol{L}-2\left(\frac{\hbar}{i}\right)^2\frac{\kappa\boldsymbol{x}}{r^3}\end{aligned} \tag{14}$$

と

$$\boldsymbol{x}\cdot(\boldsymbol{x}\times\boldsymbol{L})=0 \tag{15}$$

より、

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{M}^2 = &\frac{1}{2m_e}(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{L}-\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{p})\cdot\boldsymbol{x}H \\
&+\frac{1}{2m_e}\boldsymbol{x}\cdot(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{L}-\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{p})H+\frac{\hbar^2}{m_e}\frac{\kappa}{r}-\frac{\hbar^2\boldsymbol{p}^2}{2m_e^2}+\kappa^2 \\
&=\frac{1}{2m_e}\left\{(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{L}-\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{p})\cdot\boldsymbol{x}+\boldsymbol{x}\cdot(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{L}-\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{p})-2\hbar^2\right\}H \\
&+\kappa^2
\end{aligned}
\tag{16}
$$

となる。

ここで、内積の三重積を用いると、

$$
\boldsymbol{x}\cdot(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{L})=(\boldsymbol{x}\times\boldsymbol{p})\cdot\boldsymbol{L}=\boldsymbol{L}^2 \tag{17}
$$

である。また、

$$
[p_i, L_j]=\frac{\hbar}{i}\sum_n \epsilon_{inj}p_n \tag{18}
$$

である。これらを用いると、

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{p} &= \sum_{ijk}\epsilon_{ijk}\boldsymbol{e}_k L_i p_j \\
&= \sum_{ijk}\epsilon_{ijk}\boldsymbol{e}_k\left(p_j L_i-\frac{\hbar}{i}\sum_n \epsilon_{jni}p_n\right) \\
&= -\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{L}-2\frac{\hbar}{i}\boldsymbol{p}
\end{aligned}
\tag{19}
$$

となり、

$$\boldsymbol{x}\cdot(\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{p}) = \boldsymbol{x}\cdot\left(-\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{L} - 2\frac{\hbar}{i}\boldsymbol{p}\right) = -\boldsymbol{L}^2 - 2\frac{\hbar}{i}\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{p} \tag{20}$$

が成立する。さらに、

$$[L_i, x_j] = \frac{\hbar}{i}\sum_n \epsilon_{inj} x_n \tag{21}$$

を用いることにより、

$$
\begin{aligned}
(\boldsymbol{p} \times \boldsymbol{L}) \cdot \boldsymbol{x} &= \sum_{ijk} \epsilon_{ijk} p_i L_j x_k \\
&= \sum_{ijk} \epsilon_{ijk} p_i \left(x_k L_j + \frac{\hbar}{i} \epsilon_{jik} x_i \right) \\
&= \sum_{ijk} \epsilon_{ijk} \left(x_k p_i L_j - \frac{\hbar}{i} \epsilon_{ijk} \left(\frac{\hbar}{i} - x_i p_i \right) \right) \\
&= \boldsymbol{x} \cdot (\boldsymbol{p} \cdot \boldsymbol{L}) - 2\frac{\hbar}{i} \boldsymbol{x} \cdot \boldsymbol{p} + 6\hbar^2 \\
&= \boldsymbol{L}^2 - 2\frac{\hbar}{i} \boldsymbol{x} \cdot \boldsymbol{p} + 6\hbar^2 \\
(\boldsymbol{L} \times \boldsymbol{p}) \cdot \boldsymbol{x} &= \left(-\boldsymbol{p} \times \boldsymbol{L} - 2\frac{\hbar}{i} \boldsymbol{p} \right) \cdot \boldsymbol{x} \qquad (22) \\
&= -\left(\boldsymbol{L}^2 - 2\frac{\hbar}{i} \boldsymbol{x} \cdot \boldsymbol{p} + 6\hbar^2 \right) \\
&\quad - 6 \left(\frac{\hbar}{i} \right)^2 - 2\frac{\hbar}{i} \boldsymbol{x} \cdot \boldsymbol{p} \\
&= -\boldsymbol{L}^2 \qquad (23)
\end{aligned}
$$

となる。

以上より、

$$
\boldsymbol{M}^2 = \frac{2}{m_e} (\boldsymbol{L}^2 + \hbar^2) H + \kappa^2 \qquad (24)
$$

となる。