水素様原子における量子力学版 Laplace-Runge-Lenz ベクトル （その 3）

adhara*

2016 年 12 月 23 日

1　ハミルトニアンと対応する Laplace-Runge-Lenz ベクトル

ハミルトニアン

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

* Twitter @adhara_mathphys

に対する量子力学版 Laplace-Runge-Lenz ベクトルは

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

で与えられる。（$|\boldsymbol{x}|=r$）

このノートでは以下の後々重要となる交換関係を計算する。

$$
[L_i, L_j] = i\hbar\sum_m \epsilon_{ijm}L_m \tag{3}
$$

$$
[M_i, L_j] = i\hbar\sum_k \epsilon_{ijk}M_k \tag{4}
$$

$$
[M_i, M_j] = -\frac{2}{m_e}i\hbar H\sum_m \epsilon_{ijm}L_m \tag{5}
$$

■$[L_i, L_j]$ の計算

角運動量演算子についての交換関係は、

$$
\begin{aligned}
[L_i, L_j] &= \sum_{klmn} \epsilon_{ikl}\epsilon_{jmn}(x_k p_l x_m p_n - x_m p_n x_k p_l) \\
&= \sum_{klmn} \left(\epsilon_{ikl}\epsilon_{jmn} - \epsilon_{jkl}\epsilon_{imn}\right) x_k p_l x_m p_n \\
&= \sum_{klmn} \left(\epsilon_{ikl}\epsilon_{jmn} - \epsilon_{jkl}\epsilon_{imn}\right) x_k \left(x_m p_l + \frac{\hbar}{i}\delta_{lm}\right) p_n \\
&= \frac{\hbar}{i} \sum_{klmn} \left(\epsilon_{ikl}\epsilon_{jmn} - \epsilon_{jkl}\epsilon_{imn}\right) \delta_{lm} x_k p_n \\
&+ \sum_{klmn} \left(\epsilon_{ikl}\epsilon_{jmn} - \epsilon_{jkl}\epsilon_{imn}\right) x_k x_m p_l p_n \\
&= \frac{\hbar}{i} \sum_{m} (\epsilon_{ijm}\epsilon_{jmi} x_j p_i - \epsilon_{jim}\epsilon_{imj} x_i p_j) \\
&+ \sum_{klmn} (\epsilon_{ikl}\epsilon_{jmn} x_k x_m p_l p_n - \epsilon_{jmn}\epsilon_{ikl} x_m x_k p_n p_l) \\
&= -\frac{\hbar}{i} \sum_{m} \epsilon_{ijm}^2 (x_i p_j - x_j p_i) \\
&= i\hbar \sum_{m} \epsilon_{ijm} L_m
\end{aligned} \tag{6}
$$

となる。具体的には、

$$
[L_x, L_y] = i\hbar L_z \tag{7}
$$

等が成立する。

■$[M_i, L_j]$ の計算

まず、

$$
\begin{aligned}
\left[\frac{x_i}{r}, L_j\right] &= \sum_{kl} \epsilon_{jkl} \left[\frac{x_i}{r}, x_k p_l\right] \\
&= -\frac{\hbar}{i} \sum_{kl} \epsilon_{jkl} x_k \frac{\partial}{\partial x_l} \left(\frac{x_i}{r}\right) \\
&= -\frac{\hbar}{i} \sum_{kl} \epsilon_{jkl} x_k \left(\frac{\delta_{il}}{r} - \frac{x_i x_l}{r^3}\right) \\
&= -\frac{\hbar}{i} \frac{1}{r} \sum_{kl} \epsilon_{ijk} x_k
\end{aligned} \tag{8}
$$

が成立する。

また、

$$
[(\boldsymbol{p} \times \boldsymbol{L})_i, L_j] = \sum_{mn} \epsilon_{imn} (p_m L_n L_j - L_j p_m L_n) \tag{9}
$$

$$
[(\boldsymbol{L} \times \boldsymbol{p})_i, L_j] = \sum_{mn} \epsilon_{imn} (L_m p_n L_j - L_j L_m p_n) \tag{10}
$$

について、

$$
[L_n, L_j] = -\frac{\hbar}{i} \sum_{k} \epsilon_{njk} L_k \tag{11}
$$

$$
\begin{aligned}
[p_m, L_j] &= \sum_{kl} \epsilon_{jkl} (p_m x_k p_l - x_k p_l p_i) \\
&= \frac{\hbar}{i} \sum_{l} \epsilon_{jml} p_l
\end{aligned} \tag{12}
$$

を用いることにより、

$$\begin{aligned}
[(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{L})_i, L_j] &= \frac{\hbar}{i}\sum_{kmn}\epsilon_{imn}\left(\epsilon_{jmk}p_kL_n - \epsilon_{njk}p_mL_k\right) \\
&= \frac{\hbar}{i}\sum_{kmn}\left(\epsilon_{imn}\epsilon_{jmk}p_kL_n - \epsilon_{inm}\epsilon_{mjk}p_nL_k\right) \\
&= \frac{\hbar}{i}\sum_{kmn}\epsilon_{imn}\epsilon_{jmk}\left(p_kL_n - p_nL_k\right) \\
&= \frac{\hbar}{i}\sum_{m}\epsilon_{imj}\epsilon_{jmi}\left(p_iL_j - p_jL_i\right) \\
&= -\frac{\hbar}{i}\sum_{m}\epsilon_{ijm}^2\left(p_iL_j - p_jL_i\right) \\
&= i\hbar\sum_{m}\epsilon_{ijm}\left(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{L}\right)_m
\end{aligned} \tag{13}$$

および、

$$\begin{aligned}
[(\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{p})_i, L_j] &= \frac{\hbar}{i}\sum_{kmn}\epsilon_{imn}\left(\epsilon_{jnk}L_mp_k - \epsilon_{mjk}L_kp_n\right) \\
&= \frac{\hbar}{i}\sum_{kmn}\epsilon_{imn}\epsilon_{jnk}\left(L_mp_k - L_kp_m\right) \\
&= \frac{\hbar}{i}\sum_{n}\epsilon_{ijn}\epsilon_{jni}\left(L_jp_i - L_ip_j\right) \\
&= -\frac{\hbar}{i}\sum_{n}\epsilon_{ijn}^2\left(L_ip_j - L_jp_i\right) \\
&= i\hbar\sum_{n}\epsilon_{ijn}\left(\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{p}\right)_n
\end{aligned} \tag{14}$$

が成立する。

したがって、式 8、式 13、式 14 より、

$$[M_i, L_j] = \frac{1}{2m_e}\left[(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{L})_i, \boldsymbol{L}_j\right] - \frac{1}{2m_e}\left[(\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{p})_i, \boldsymbol{L}_j\right] - \kappa\left[\frac{x_i}{r}, L_j\right] = i\hbar\sum_k \epsilon_{ijk}M_k \tag{15}$$

が示せる。具体的には、

$$[M_x, L_y] = i\hbar M_z \tag{16}$$

等が成立する。

■$[M_i, M_j]$ の計算

$[(\boldsymbol{p}\times L - \boldsymbol{L}\times\boldsymbol{p})_i, (\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{L} - \boldsymbol{L}\times\boldsymbol{p})_j]$ の計算

$$\begin{aligned}&[(\boldsymbol{p}\times L - \boldsymbol{L}\times\boldsymbol{p})_i, (\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{L} - \boldsymbol{L}\times\boldsymbol{p})_j] \\ =& \sum_{klmn}\left(\epsilon_{ikl}\epsilon_{jmn} - \epsilon_{jmn}\epsilon_{ikl}\right) \\ \times& \left(p_kL_lp_mL_n - L_kp_lp_mL_n + L_kp_lL_mp_n - p_kL_lL_mp_n\right)\end{aligned} \tag{17}$$

となるが、

$$[p_m, L_j] = \frac{\hbar}{i}\sum_l \epsilon_{jml}p_l$$

を使用すると、

$$
\begin{aligned}
&[(\boldsymbol{p}\times L-\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{p})_i,(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{L}-\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{p})_j]\\
&=4\sum_{klmn}\left(\epsilon_{ikl}\epsilon_{jmn}-\epsilon_{jmn}\epsilon_{ikl}\right)p_kL_lp_mL_n\\
&+\frac{2\hbar}{i}\sum_{klmns}\left(\epsilon_{ikl}\epsilon_{jmn}-\epsilon_{jmn}\epsilon_{ikl}\right)\epsilon_{kls}p_sp_mL_n\\
&+\frac{2\hbar}{i}\sum_{klmns}\left(\epsilon_{ikl}\epsilon_{jmn}-\epsilon_{jmn}\epsilon_{ikl}\right)\epsilon_{mns}p_kp_lL_s\\
&-\hbar^2\sum_{klmnst}\left(\epsilon_{ikl}\epsilon_{jmn}-\epsilon_{jmn}\epsilon_{ikl}\right)\epsilon_{kns}\epsilon_{mnt}p_sp_t
\end{aligned}
\tag{18}
$$

第二，第三、第四項はゼロとなり、さらに変形を進めると、

$$
\begin{aligned}
&[(\boldsymbol{p}\times L-\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{p})_i,(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{L}-\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{p})_j]\\
&=4\sum_{klmn}\left(\epsilon_{ikl}\epsilon_{jmn}-\epsilon_{jmn}\epsilon_{ikl}\right)p_kL_lp_mL_n\\
&=4\sum_{klmn}\Bigg(\epsilon_{ijl}\epsilon_{jin}\delta_{jk}\delta_{im}+\epsilon_{ijl}\epsilon_{jmi}\delta_{jk}\delta_{in}\\
&+\epsilon_{ikj}\epsilon_{jin}\delta_{jl}\delta_{im}+\epsilon_{ikj}\epsilon_{jmi}\delta_{jl}\delta_{in}\\
&-\epsilon_{ijn}\epsilon_{jil}\delta_{jm}\delta_{ik}-\epsilon_{ijn}\epsilon_{jki}\delta_{jm}\delta_{il}\\
&-\epsilon_{imj}\epsilon_{jil}\delta_{jn}\delta_{ik}-\epsilon_{imj}\epsilon_{jki}\delta_{jn}\delta_{il}\Bigg)\\
&\times\left(p_kp_mL_lL_n-\frac{\hbar}{i}\sum_s\epsilon_{lms}p_kp_sL_n\right)
\end{aligned}
\tag{19}
$$

となる。式 19 の第一項は、

$$
\begin{aligned}
&4\sum_{klmn}(\epsilon_{ijl}\epsilon_{jin}\delta_{jk}\delta_{im}+\epsilon_{ijl}\epsilon_{jmi}\delta_{jk}\delta_{in}\\
&+\epsilon_{ikj}\epsilon_{jin}\delta_{jl}\delta_{im}+\epsilon_{ikj}\epsilon_{jmi}\delta_{jl}\delta_{in}\\
&-\epsilon_{ijn}\epsilon_{jil}\delta_{jm}\delta_{ik}-\epsilon_{ijn}\epsilon_{jki}\delta_{jm}\delta_{il}\\
&-\epsilon_{imj}\epsilon_{jil}\delta_{jn}\delta_{ik}-\epsilon_{imj}\epsilon_{jki}\delta_{jn}\delta_{il})\\
&\times p_k p_m L_l L_n\\
&=4\sum_m \epsilon_{ijm}^2 p_m(p_j L_m L_i+p_i L_j L_m-p_j L_i L_m-p_i L_m L_j)\\
&+4\sum_m \epsilon_{imj}\epsilon_{jmi}p_m^2(L_j L_i-L_i L_j)\\
&=4\sum_m \epsilon_{imj}^2 p_m\left(p_j[L_m,L_i]-p_i[L_m,L_j]+p_m[L_i,L_j]\right)\\
&=-4\frac{\hbar}{i}\sum_m \epsilon_{ijm}p_m(p_i L_i+p_j L_j+p_m L_m) \qquad (20)
\end{aligned}
$$

となる。途中の変形で、

$$[L_i,L_j]=-\frac{\hbar}{i}\sum_m \epsilon_{ijm}L_m$$

を用いた。

式 19 の第二項は、

$$
\begin{aligned}
&4\sum_{klmn}(\epsilon_{ijl}\epsilon_{jin}\delta_{jk}\delta_{im}+\epsilon_{ijl}\epsilon_{jmi}\delta_{jk}\delta_{in}\\
&+\epsilon_{ikj}\epsilon_{jin}\delta_{jl}\delta_{im}+\epsilon_{ikj}\epsilon_{jmi}\delta_{jl}\delta_{in}\\
&-\epsilon_{ijn}\epsilon_{jil}\delta_{jm}\delta_{ik}-\epsilon_{ijn}\epsilon_{jki}\delta_{jm}\delta_{il}\\
&-\epsilon_{imj}\epsilon_{jil}\delta_{jn}\delta_{ik}-\epsilon_{imj}\epsilon_{jki}\delta_{jn}\delta_{il})\\
&\times\left(-\frac{\hbar}{i}\sum_{s}\epsilon_{lms}p_kp_sL_n\right)\\
&=-4\frac{\hbar}{i}\sum_{m}(\epsilon_{ijm}\epsilon_{jim}\epsilon_{mij}p_jp_jL_m+\epsilon_{imj}\epsilon_{jim}\epsilon_{jim}p_mp_mL_m\\
&+\epsilon_{imj}\epsilon_{jmi}\epsilon_{jmi}p_mp_iL_i-\epsilon_{ijm}\epsilon_{jim}\epsilon_{mji}p_ip_iL_m\\
&-\epsilon_{ijm}\epsilon_{jmi}\epsilon_{ijm}p_mp_mL_m-\epsilon_{imj}\epsilon_{jmi}\epsilon_{imj}p_mp_jL_j)\\
&=4\frac{\hbar}{i}\sum_{m}\epsilon_{ijm}p_m(p_iL_i+p_jL_j)\\
&+4\frac{\hbar}{i}\sum_{m}\epsilon_{ijm}(p_i^2+p_j^2+2p_m^2)L_m
\end{aligned}
\tag{21}
$$

となる。式 19、式 20、式 21 より、

$$
\left[(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{L}-\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{p})_i,(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{L}-\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{p})_j\right]=4\frac{\hbar}{i}\boldsymbol{p}^2\sum_{m}\epsilon_{ijm}L_m
\tag{22}
$$

となる。

$\left[(\boldsymbol{p}\times L-\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{p})_i,\frac{x_j}{r}\right]$ の計算

$$
\begin{aligned}
\left[(\boldsymbol{p}\times L-\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{p})_i,\frac{x_j}{r}\right] &= \sum_{kl}\epsilon_{ikl}\left[(p_kL_l-L_kp_l),\frac{x_j}{r}\right] \\
&= \sum_{kl}\epsilon_{ikl}\left[(p_kL_l+L_lp_k),\frac{x_j}{r}\right] \\
&= 2\sum_{kl}\epsilon_{ikl}\left[p_kL_l,\frac{x_j}{r}\right] \\
&- \frac{\hbar}{i}\sum_{skl}\epsilon_{ikl}\epsilon_{lks}\left[p_s,\frac{x_j}{r}\right] \qquad (23)
\end{aligned}
$$

となるが、式 23 の第二項は、

$$
\begin{aligned}
-\frac{\hbar}{i}\sum_{skl}\epsilon_{ikl}\epsilon_{lks}\left[p_s,\frac{x_j}{r}\right] &= -\left(\frac{\hbar}{i}\right)^2\sum_{kls}\epsilon_{ikl}\epsilon_{kls}\left(\frac{\delta_{sj}}{r}-\frac{x_jx_s}{r^3}\right) \\
&= \left(\frac{\hbar}{i}\right)^2\sum_{kls}\epsilon_{ikl}^2\left(\frac{\delta_{ij}}{r}-\frac{x_jx_i}{r^3}\right) \\
&= 2\left(\frac{\hbar}{i}\right)^2\left(\frac{\delta_{ij}}{r}-\frac{x_jx_i}{r^3}\right) \qquad (24)
\end{aligned}
$$

となり、式 23 の第一項は、

$$
\begin{aligned}
&2\sum_{kl}\epsilon_{ikl}\left[p_k L_l, \frac{x_j}{r}\right] \\
&= 2\sum_{klmn}\epsilon_{ikl}\epsilon_{lmn}\left(p_k x_m p_n \frac{x_j}{r} - \frac{x_j}{r} p_k x_m p_n\right) \\
&= 2\frac{\hbar}{i}\sum_{klmn}\epsilon_{ikl}\epsilon_{lmn}\Bigg\{\left(\frac{\delta_{jk}}{r} - \frac{x_k x_j}{r^3}\right) x_m p_n \\
&+ p_k x_m \left(\frac{\delta_{jn}}{r} - \frac{x_n x_j}{r^3}\right)\Bigg\} \\
&= 2\frac{\hbar}{i}\sum_{kl}\epsilon_{ikl}\left(\frac{\delta_{jk}}{r} - \frac{x_k x_j}{r^3}\right) L_l \\
&+ 2\frac{\hbar}{i}\sum_{kl}\epsilon_{ikl}\sum_{mn}\epsilon_{lmn} p_k x_m \frac{\delta_{jn}}{r} \\
&= 2\frac{\hbar}{i}\sum_{l}\epsilon_{ijl}\frac{1}{r}L_l - 2\frac{\hbar}{i}\frac{x_j}{r^3}(\boldsymbol{x}\times\boldsymbol{L})_i \\
&+ 2\frac{\hbar}{i}\sum_{kl}\epsilon_{ikl}\sum_{m}\epsilon_{lmj} p_k x_m \frac{1}{r}
\end{aligned}
\tag{25}
$$

となる。したがって、式 23、式 25、式 24 より、

$$\left[(\boldsymbol{p}\times L-\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{p})_i,\frac{x_j}{r}\right]=2\frac{\hbar}{i}\sum_l\epsilon_{ijl}\frac{1}{r}L_l-2\frac{\hbar}{i}\frac{x_j}{r^3}(\boldsymbol{x}\times\boldsymbol{L})_i$$
$$+2\frac{\hbar}{i}\sum_{kl}\epsilon_{ikl}\sum_m\epsilon_{lmj}p_kx_m\frac{1}{r}$$
$$+2\left(\frac{\hbar}{i}\right)^2\left(\frac{\delta_{ij}}{r}-\frac{x_jx_i}{r^3}\right)\tag{26}$$

となる。

$\left[(\boldsymbol{p}\times L-\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{p})_i,\frac{x_j}{r}\right]+\left[\frac{x_i}{r},(\boldsymbol{p}\times L-\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{p})_j\right]$ **の計算**

式を用いると、

$$\left[(\boldsymbol{p}\times L-\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{p})_i,\frac{x_j}{r}\right]+\left[\frac{x_i}{r},(\boldsymbol{p}\times L-\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{p})_j\right]$$
$$=\frac{4\hbar}{i}\sum_{kl}\epsilon_{ijl}\frac{1}{r}L_l+\frac{2\hbar}{i}\frac{1}{r^3}\{x_i(\boldsymbol{x}\times\boldsymbol{L})_j-x_j(\boldsymbol{x}\times\boldsymbol{L})_i\}$$
$$+\frac{2\hbar}{i}\sum_{klm}\epsilon_{ikl}\epsilon_{lmj}(p_kx_m-p_mx_k)\frac{1}{r}\tag{27}$$

となる。ここで、式 27 右辺第三項は、

$$
\begin{aligned}
&\frac{2\hbar}{i}\sum_{klm}\epsilon_{ikl}\epsilon_{lmj}(p_k x_m - p_m x_k)\frac{1}{r} \\
&= \frac{2\hbar}{i}\sum_{l}\epsilon_{ijl}^2(p_j x_i - p_i x_j)\frac{1}{r} \\
&= \frac{2\hbar}{i}\sum_{l}\epsilon_{ijl}^2(x_i p_j - x_j p_i)\frac{1}{r} \\
&= \frac{2\hbar}{i}\sum_{l}\epsilon_{ijl}L_l\frac{1}{r} \\
&= \frac{2\hbar}{i}\frac{1}{r}\sum_{l}\epsilon_{ijl}L_l
\end{aligned}
\tag{28}
$$

、式 27 右辺第二項は、

$$
\begin{aligned}
&\frac{2\hbar}{i}\frac{1}{r^3}\{x_i(\boldsymbol{x}\times\boldsymbol{L})_j - x_j(\boldsymbol{x}\times\boldsymbol{L})_i\} \\
&= \frac{2\hbar}{i}\frac{1}{r^3}\sum_{l}\epsilon_{ijl}^2\{x_i(\boldsymbol{x}\times\boldsymbol{L})_j - x_j(\boldsymbol{x}\times\boldsymbol{L})_i\} \\
&= \frac{2\hbar}{i}\frac{1}{r^3}\sum_{l}\epsilon_{ijl}\{\boldsymbol{x}\times(\boldsymbol{x}\times\boldsymbol{L})\}_l \\
&= \frac{2\hbar}{i}\frac{1}{r^3}\sum_{l}\epsilon_{ijl}\{\boldsymbol{x}\times[\boldsymbol{x}(\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{p}) - \boldsymbol{x}^2\boldsymbol{p}]\}_l \\
&= -\frac{2\hbar}{i}\frac{1}{r}\sum_{l}\epsilon_{ijl}L_l
\end{aligned}
\tag{29}
$$

となる。

したがって、

$$\left[(\boldsymbol{p}\times L-\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{p})_i,\frac{x_j}{r}\right]+\left[\frac{x_i}{r},(\boldsymbol{p}\times L-\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{p})_j\right]$$
$$=\frac{4\hbar}{i}\sum_{kl}\epsilon_{ijl}\frac{1}{r}L_l \tag{30}$$

式 30 と式 22 より、

$$\begin{aligned}[M_i,M_j]&=\frac{1}{4m_e^2}\left[(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{L}-\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{p})_i,(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{L}-\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{p})_j\right]\\
&-\frac{\kappa}{2m_e}\left\{\left[(\boldsymbol{p}\times L-\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{p})_i,\frac{x_j}{r}\right]\right.\\
&\left.+\left[\frac{x_i}{r},(\boldsymbol{p}\times L-\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{p})_j\right]\right\}\\
&=-\frac{2}{m_e}i\hbar\left(\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m_e}-\frac{\kappa}{r}\right)\sum_m\epsilon_{ijm}L_m\\
&=-\frac{2}{m_e}i\hbar H\sum_m\epsilon_{ijm}L_m \qquad (31)\end{aligned}$$

が導出される。