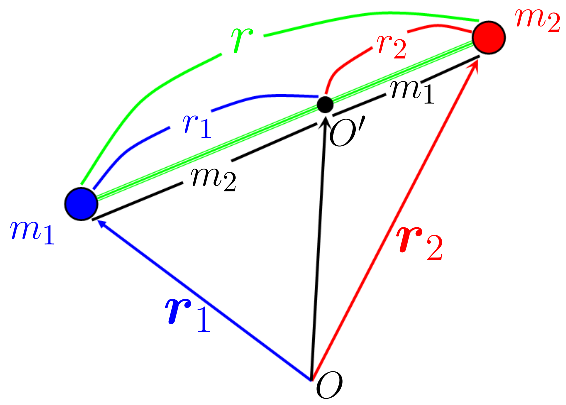
剛体回転子の波動関数

右の図のように，長さ r の剛体棒の両端に，それぞれ質量 m_1，m_2 の質点がしっかり接続され，外力を受けずに運動しているものとする．剛体棒自体は質点と比べ充分軽くてその重さは無視できるものとする．質点 m_1 の位置ベクトルを $\boldsymbol{r}_1$，質点 m_2 の位置ベクトルを $\boldsymbol{r}_2$ とし，また, この剛体回転子の重心の位置を O'，重心から m_1 までの長さを r_1，m_2 までの長さを r_2 とするとき，この剛体回転子の満たすべき条件は



剛体回転子

$$
\begin{cases}
m_1 \dfrac{d^2\boldsymbol{r}_1}{dt^2} = \boldsymbol{F}_1, \\
m_2 \dfrac{d^2\boldsymbol{r}_2}{dt^2} = \boldsymbol{F}_2, \\
\boldsymbol{F}_2 = -\boldsymbol{F}_1, \qquad (\because \text{作用反作用}) \\
||\boldsymbol{r}_2 - \boldsymbol{r}_1|| = r, \quad (\because \text{剛体は伸び縮みしない})
\end{cases}
$$

となります．この式より，まず,

$$
m_1 \frac{d^2\boldsymbol{r}_1}{dt^2} + m_2 \frac{d^2\boldsymbol{r}_2}{dt^2} = \boldsymbol{F}_1 + \boldsymbol{F}_2 = 0
$$

が得られますが，これは次のように変形できます:

$$
(m_1 + m_2) \frac{d^2}{dt^2} \left(\frac{m_1\boldsymbol{r}_1 + m_2\boldsymbol{r}_2}{m_1 + m_2} \right) = 0
$$

ここで明らかにこの運動方程式は,

$$
\boldsymbol{R} = \frac{m_1\boldsymbol{r}_1 + m_2\boldsymbol{r}_2}{m_1 + m_2}
$$

に，質量 $M = m_1 + m_2$ の質点が外力を受けずに運動しているときの運動方程式,

$$
M \frac{d^2\boldsymbol{R}}{dt^2} = 0
$$

を表しています．

$$
\boldsymbol{R} = \frac{m_1\boldsymbol{r}_1 + m_2\boldsymbol{r}_2}{m_1 + m_2}
$$

は，ベクトルの計算により，質点 m_1 と質点 m_2 の間を m_2 対 m_1 に分割する点を表し，重心と呼ばれる点です．これより,

$$
\begin{aligned}
r_1 &= \frac{m_2}{m_1 + m_2} r, \\
r_2 &= \frac{m_1}{m_1 + m_2} r,
\end{aligned}
$$

と求まります．従ってこの剛体回転子は重心 O' を中心に回転運動することになります．そこで次にこの回転運動について分析してみましょう．

まず，回転力を表す力のモーメント $\boldsymbol{N}$ は位置ベクトル $\boldsymbol{r}$ の長さと，それに直交する力 $\boldsymbol{F}$ の成分に比例するので,

$$
\boldsymbol{N} \stackrel{\text{def}}{=} \boldsymbol{r} \times \boldsymbol{F} = \frac{d(\boldsymbol{r} \times m\boldsymbol{v})}{dt}
$$

と表せます．ここで $\boldsymbol{L} \stackrel{\text{def}}{=} \boldsymbol{r} \times m\boldsymbol{v}$ は，運動量が力に対応するように，力のモーメントに対応する量で，角運動量と呼ばれます．

ここで，この定義を剛体回転子に当てはめて考えてみると，いま，運動方程式は，座標系のとり方によらずに成り立つので，特に一番簡単な重心を基準にして考えると，この剛体回転子が角速度 ω で回転しているものとすると，m_1 と m_2 の角運動量の大きさはそれぞれ,

$$L_1 = r_1 \times m_1 r_1 \omega = m_1 {r_1}^2 \omega,$$
$$L_2 = r_2 \times m_2 r_2 \omega = m_2 {r_2}^2 \omega,$$

で，向きも同じ向きになっている．従って，全角運動量 L はその和,

$$L = m_1 {r_1}^2 \omega + m_2 {r_2}^2 \omega = (m_1 {r_1}^2 + m_2 {r_2}^2)\omega$$

で表される．ここで運動量を質量 m と速度 v の積で表せることに対応して，角運動量を慣性モーメント I と呼ばれるものと角速度 ω の積で表せるものとすると，定義より，

$$I = m_1 {r_1}^2 + m_2 {r_2}^2 = m_1 \left(\frac{m_2}{m_1 + m_2} r \right)^2 + m_2 \left(\frac{m_1}{m_1 + m_2} r \right)^2 = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} r^2$$

となる．するとこのとき，全角運動量は,

$$L = I\omega = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} r^2 \omega$$

と表されるが，これは,

$$\mu \equiv \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$$

と置いたとき，中心から r 離れたところを質量 μ の質点が角速度 ω で運動している場合と一緒となっている．このとき，外部からのポテンシャルの作用が全くなければ，全エネルギー E と運動エネルギー T は一致して,

$$E = T = \frac{1}{2} I \omega^2 = \frac{L^2}{2I}$$

と表される．この系に対するシュレディンガー方程式は,

$$\nabla^2 u + \frac{2\mu E}{\hbar^2} u = 0$$

と表されるので，$\mu = I/r^2$ を代入して,

$$\nabla^2 u + \frac{2IE}{r^2 \hbar^2} u = 0$$

が得られる．これが剛体振動子が満たすべきシュレディンガー方程式である．計算をしやすくするため球座標で表すと,

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

であるが，いま剛体回転子の場合 r は定数なので r の微分を含む項は消える． 従って，シュレディンガー方程式は,

$$\frac{1}{r^2 \sin\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin\theta \frac{\partial u}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2\theta} \frac{\partial^2 u}{\partial \varphi^2} + \frac{2IE}{r^2 \hbar^2} u = 0$$

即ち,

$$\frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin\theta \frac{\partial u}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2 u}{\partial \varphi^2} + \frac{2IE}{\hbar^2} u = 0$$

という形になる．この式を解くために,

$$u(\theta,\ \varphi) \equiv \Theta(\theta) \mathit{\Phi}(\varphi) \tag{1}$$

と変数分離して，(1) に代入すると，$\Theta(\theta)$ と $\Phi(\varphi)$ が独立だから,

$$\frac{1}{\sin\theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin\theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) \mathit{\Phi} + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{d^2 \mathit{\Phi}}{d\varphi^2} \Theta + \frac{2IE}{\hbar^2} \Theta \mathit{\Phi} = 0$$

となるので，両辺に $\dfrac{\sin^2\theta}{\Theta\Phi}$ を掛けると，

$$\frac{\sin\theta}{\Theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d\Theta}{d\theta}\right)+\frac{1}{\Phi}\frac{d^2\Phi}{d\varphi^2}+\frac{2IE}{\hbar^2}\sin^2\theta=0$$

が得られる．従って，

$$\frac{\sin\theta}{\Theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d\Theta}{d\theta}\right)+\frac{2IE}{\hbar^2}\sin^2\theta=-\frac{1}{\Phi}\frac{d^2\Phi}{d\varphi^2} \tag{2}$$

ここでこの式の左辺は θ だけの式で，右辺は φ だけの式だから，この式の両辺はある定数になっているに違いない．そこで現時点ではこの定数がどのようなものかは分からないが，後の便宜のためにこの定数を m^2 と置くことにしよう．すると（2）式より，二つの方程式,

$$\begin{aligned}&-\frac{1}{\Phi}\frac{d^2\Phi}{d\varphi^2}=m^2,\\&\frac{\sin\theta}{\Theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d\Theta}{d\theta}\right)+\frac{2IE}{\hbar^2}\sin^2\theta=m^2,\end{aligned}$$

が得られる．この二つの式を整理して,

$$\frac{d^2\Phi}{d\varphi^2}=-m^2\Phi, \tag{3}$$

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d\Theta}{d\theta}\right)+\frac{2IE}{\hbar^2}\Theta-\frac{m^2}{\sin^2\theta}\Theta=0, \tag{4}$$

としてこの (3)，(4) 式を解くことを考えよう．まず簡単な (3) 式については，明らかに

$$\begin{aligned}&\frac{d^2\Phi}{d\varphi}+m^2\Phi=0,\\\Leftrightarrow\quad&(D-mi)(D+mi)\Phi=0,\\\therefore\quad&\Phi=C_1e^{im\varphi}+C_2e^{-im\varphi}\end{aligned} \tag{5}$$

が一般解となる．ここで我々が求めようと思っているのは，一般解ではあるが，一般解はお互いに直交する成分さえ求めてしまえば，あとは単に，解の線形結合，つまり和をとればよい．従って，ここでは，この意味での一般解ではなく，

$$\Phi(\varphi)=Ce^{\pm im\varphi} \tag{6}$$

を独立な成分としての一般解とする．

さてここで φ は角度を表すのだから，波動関数が一周したとき滑らかにつながるべきであろう．(そうでなければ，波同士が打ち消しあって，波がなくなってしまう！）そこで,

$$\begin{aligned}&\Phi(\varphi+2\pi)=\Phi(\varphi),\\\Leftrightarrow\quad&Ce^{\pm im(\varphi+2\pi)}=Ce^{\pm im\varphi},\\\therefore\quad&e^{2m\pi i}=\cos 2m\pi+i\sin 2m\pi=1\end{aligned}$$

この条件より，m は任意の値を取ることが出来ず,

$$m=0,\ \pm1,\ \pm2,\ \pm3,\cdots \tag{7}$$

となることになります．(6) 式の波動関数は規格化されていませんので規格化が必要です．いま，三次元波動関数について，Born の確率解釈により，変数分離した波動関数の各成分を Ψ_r, Ψ_θ, Ψ_φ と置くと，球座標での積分への変数変換により,

$$\iiint\limits_{-\infty<x,y,z<\infty}\Psi^*\Psi dxdydz=\iiint\limits_{\substack{-\infty<r<\infty\\0\le\theta\le\pi\\0\le\varphi\le2\pi}}\Psi^*\Psi drrd\theta r\sin\theta d\varphi=\int_{-\infty}^{\infty}{\Psi_r}^*\Psi_r r^2dr\int_0^{\pi}{\Psi_\theta}^*\Psi_\theta\sin\theta d\theta\int_0^{2\pi}{\Psi_\varphi}^*\Psi_\varphi d\varphi=1$$

が要請されます．従って，

$$
\begin{aligned}
&\int_0^{2\pi} \Phi^*(\varphi)\Phi(\varphi)d\varphi = 1, \\
\Leftrightarrow \quad &\int_0^{2\pi} \left(Ce^{im\varphi}\right)^* Ce^{im\varphi}d\varphi = 1, \\
\Leftrightarrow \quad &C^*C\int_0^{2\pi} e^{-im\varphi}e^{im\varphi}d\varphi = 1, \\
\therefore \quad &|C|^2\int_0^{2\pi} d\varphi = 1, \\
\therefore \quad &2\pi|C|^2 = 1,
\end{aligned}
$$

これより，C として複素数も取れますが，一番簡単な正実数として，

$$
C = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \tag{8}
$$

と求まりました．これより，φ 方向の波動関数の成分は，$\Phi(\varphi)$ を m で分けた表記を用いて，

$$
\Phi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\varphi}, \qquad (m = 0,\ \pm1,\ \pm2,\ \pm3,\cdots) \tag{9}
$$

となることが分かりました．

次に，θ 方向の解を求めてみることにしましょう．(4) 式において，

$$
x \equiv \cos\theta \tag{10}
$$

と置くと，

$$
\frac{d}{d\theta} = \frac{dx}{d\theta}\frac{d}{dx} = -\sin\theta\frac{d}{d\theta}
$$

となるから，(4) 式の第一項目は，

$$
\begin{aligned}
\frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d\Theta}{d\theta}\right) &= \frac{1}{\sin\theta}(-\sin\theta)\frac{d}{dx}\left(-\sin^2\theta\frac{d\Theta}{dx}\right) \\
&= \frac{d}{dx}\left(\sin^2\theta\frac{d\Theta}{dx}\right) \\
&= \frac{d}{dx}\left[(1-\cos^2)\theta\frac{d\Theta}{dx}\right] \\
&= \frac{d}{dx}\left[(1-x^2)\frac{d\Theta}{dx}\right] \\
&= (1-x^2)\frac{d^2\Theta}{dx^2} - 2x\frac{d\Theta}{dx}
\end{aligned}
$$

となる．従って (4) 式は，

$$
(1-x^2)\frac{d^2\Theta}{dx^2} - 2x\frac{d\Theta}{dx} + \left[\ell(\ell+1) - \frac{m^2}{1-x^2}\right] = 0 \tag{11}
$$

と表される．但し，のちの都合上，

$$
\frac{2IE}{\hbar^2} \equiv \ell(\ell+1) \tag{12}
$$

と置いた．

(11) 式は Legendre 陪方程式と呼ばれる微分方程式で，その解は Legendre 陪関数 $P_\ell^m(x)$ で次のように定義される:

$$
P_\ell^m(x) \stackrel{\mathrm{def}}{=} \frac{1}{2^\ell \ell!}(1-x^2)^{\frac{m}{2}}\frac{d^{\ell+m}}{dx^{\ell+m}}(x^2-1)^\ell \tag{13}
$$

この解の性質その他はここでは詳しく触れない．詳しくは，拙著:「ルジャンドルの微分方程式を解く」をご覧になって下さい．

ここで重要なのは，ℓ が非負整数の場合にしかこの解が存在しないことです．これは (12) 式より，エネルギーが飛び飛びの値しか取れないことを意味します．また，(13) 式より，$|m| \leq \ell$ でなくてはなりません．

ここで規格化定数を求めるために，次の積分を計算します:

$$\int_0^\pi P_\ell^m(\cos\theta)P_\ell^m(\cos\theta)\sin\theta d\theta = \int_1^{-1} P_\ell^m(x)P_\ell^m(x)(-dx) = \int_{-1}^1 P_\ell^m(x)P_\ell^m(x)dx = \frac{2}{2\ell+1}\frac{(\ell+m)!}{(\ell-m)!} \tag{14}$$

この積分より，

$$\Theta(\theta) = \sqrt{\frac{2\ell+1}{2}\frac{(\ell-m)!}{(\ell+m)!}}P_\ell^m(\cos\theta) \tag{15}$$

となることが分かりました．

以上により，波動関数の形が完全にもとまり，

$$u(\theta,\ \varphi) = \Theta(\theta)\mathit{\Phi}(\varphi) = \sqrt{\frac{2\ell+1}{2}\frac{(\ell-m)!}{(\ell+m)!}}P_\ell^m(\cos\theta)\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\varphi} = \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}\frac{(\ell-m)!}{(\ell+m)!}}P_\ell^m(\cos\theta)e^{im\varphi}, \tag{16}$$

$$(\text{但し，}\ \ell(\ell+1) = \frac{2IE}{\hbar^2}\ \text{と置いた．}) \tag{17}$$

となることが分かりました．ここで，

$$Y_{\ell,\ m}(\theta,\ \varphi) \stackrel{\text{def}}{=} \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}\frac{(\ell-m)!}{(\ell+m)!}}P_\ell^m(\cos\theta)e^{im\varphi} \tag{18}$$

を球面調和関数といいます．