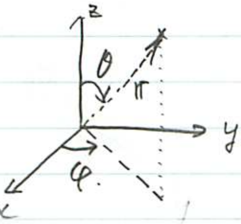
NO.

DATE . .

201310888 宮川 銀次郎 第八回.

○球面調和関数を導く.
今までの議論について, $|j,m\rangle$ を $|l,m\rangle$ として, 固有関数を導いていく.

基本, $\mathbb{L}(x,y,z)$, $\mathbb{r}(x,y,z)$, $\mathbb{P}(x,y,z)$ であるので, まず (x,y,z) と3次元極座標 (r,θ,φ) との関係を明らかにしていく.



$\mathbb{r} = \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$ として, このような (x,y,z) (r,θ,φ) を定めると, (r,θ,φ) の単位ベクトル $(\mathbb{e}_r, \mathbb{e}_\theta, \mathbb{e}_\varphi)$ について

$(\mathbb{e}_r, \mathbb{e}_\theta, \mathbb{e}_\varphi)$ は右手系を成すとわかる.
$(\mathbb{e}_r \times \mathbb{e}_\theta = \mathbb{e}_\varphi,\ \mathbb{e}_\theta \times \mathbb{e}_\varphi = \mathbb{e}_r,\ \mathbb{e}_\varphi \times \mathbb{e}_r = \mathbb{e}_\theta)$
(x,y,z) は (r,θ,φ) を使って,

$$\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = r \begin{pmatrix} \sin\theta\cos\varphi \\ \sin\theta\sin\varphi \\ \cos\theta \end{pmatrix} (\mathbb{e}_r, \mathbb{e}_\theta, \mathbb{e}_\varphi)$$

$(\mathbb{e}_r, \mathbb{e}_\theta, \mathbb{e}_\varphi)$ を微分形で表すと,
規格化定数をそれぞれ h_r, h_θ, h_φ として

$$(\mathbb{e}_r, \mathbb{e}_\theta, \mathbb{e}_\varphi) = \left(\frac{1}{h_r}\partial_r \mathbb{r},\ \frac{1}{h_\theta}\partial_\theta \mathbb{r},\ \frac{1}{h_\varphi}\partial_\varphi \mathbb{r}\right)$$

各成分3つあるのでこれは3×3行列.

規格化定数について,

$h_r = \sqrt{\partial_r \mathbb{r}\cdot\partial_r \mathbb{r}} = 1$, $h_\theta = \sqrt{\partial_\theta \mathbb{r}\cdot\partial_\theta \mathbb{r}} = r$.

$h_\varphi = \sqrt{\partial_\varphi \mathbb{r}\cdot\partial_\varphi \mathbb{r}} = r\sin\theta \quad (\sin\theta \geq 0)$

となるので, $(\mathbb{e}_r, \mathbb{e}_\theta, \mathbb{e}_\varphi)$ の微分形は,

$$(\mathbb{e}_r, \mathbb{e}_\theta, \mathbb{e}_\varphi) = \begin{pmatrix} \sin\theta\cos\varphi & \cos\theta\cos\varphi & -\sin\varphi \\ \sin\theta\sin\varphi & \cos\theta\sin\varphi & \cos\varphi \\ \cos\theta & -\sin\theta & 0 \end{pmatrix} \overset{\text{def.}}{\equiv} T$$

この T について, $\tilde{T}\cdot T$ を考えてみると

$$\begin{pmatrix} \tilde{\mathbb{e}}_r \\ \tilde{\mathbb{e}}_\theta \\ \tilde{\mathbb{e}}_\varphi \end{pmatrix} (\mathbb{e}_r\ \mathbb{e}_\theta\ \mathbb{e}_\varphi) = \begin{pmatrix} \mathbb{e}_r\mathbb{e}_r & \mathbb{e}_r\mathbb{e}_\theta & \mathbb{e}_r\mathbb{e}_\varphi \\ & \ddots & \end{pmatrix}$$

$$= E_3.$$

よって $\tilde{T} = T^{-1}$
$\mathbb{P}$ は $\mathbb{P} = -i\hbar\nabla$ から, ∇ を (r,θ,φ) の形で欲しい
そこで $(\partial_r\ \partial_\theta\ \partial_\varphi)^t$ を考えてみると,

$$\begin{pmatrix} \partial_r \\ \partial_\theta \\ \partial_\varphi \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \widetilde{\partial_r \mathbb{r}} \\ \widetilde{\partial_\theta \mathbb{r}} \\ \widetilde{\partial_\varphi \mathbb{r}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \partial_x \\ \partial_y \\ \partial_z \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} h_r\tilde{\mathbb{e}}_r \\ h_\theta\tilde{\mathbb{e}}_\theta \\ h_\varphi\tilde{\mathbb{e}}_\varphi \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \partial_x \\ \partial_y \\ \partial_z \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} h_r & 0 & 0 \\ 0 & h_\theta & 0 \\ 0 & 0 & h_\varphi \end{pmatrix} \tilde{T} \begin{pmatrix} \partial_x \\ \partial_y \\ \partial_z \end{pmatrix}$$

$$\therefore \begin{pmatrix} \partial_x \\ \partial_y \\ \partial_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} h_r^{-1} & 0 & 0 \\ 0 & h_\theta^{-1} & 0 \\ 0 & 0 & h_\varphi^{-1} \end{pmatrix} T \begin{pmatrix} \partial_r \\ \partial_\theta \\ \partial_\varphi \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow \nabla = \mathbb{e}_r\partial_r + \frac{1}{r}\mathbb{e}_\theta\partial_\theta + \frac{1}{r\sin\theta}\mathbb{e}_\varphi\partial_\varphi$$

よって $\mathbb{P} = -i\hbar\nabla$ を (r,θ,φ) でかけて, $\mathbb{L}$ を求めると

$$\mathbb{L} = \mathbb{r}\times\mathbb{P} = r\mathbb{e}_r \times (-i\hbar) \times \left(\mathbb{e}_r\partial_r + \frac{1}{r}\mathbb{e}_\theta\partial_\theta + \frac{1}{r\sin\theta}\mathbb{e}_\varphi\partial_\varphi\right)$$

$$= -i\hbar\left(\mathbb{e}_\varphi\partial_\theta - \mathbb{e}_\theta\frac{1}{\sin\theta}\partial_\varphi\right)$$

よって $\mathbb{L}$ は r に対して独立. (r 依存なし).
$\mathbb{L}$ を成分にして詳しくみていく.

$$\mathbb{L} = i\hbar\frac{1}{\sin\theta}\begin{pmatrix} \cos\theta\cos\varphi \\ \cos\theta\sin\varphi \\ -\sin\theta \end{pmatrix}\partial_\varphi - i\hbar\begin{pmatrix} -\sin\theta \\ \cos\theta \\ 0 \end{pmatrix}\partial_\theta$$

$$= i\hbar\begin{pmatrix} \cot\theta\cos\varphi \\ \cot\theta\sin\varphi \\ -1 \end{pmatrix}\partial_\varphi - i\hbar\begin{pmatrix} -\sin\theta \\ \cos\theta \\ 0 \end{pmatrix}\partial_\theta.$$

$$= \begin{pmatrix} L_x \\ L_y \\ L_z \end{pmatrix}.$$

よって、

$$
\begin{cases}
L_+ = L_x + iL_y \\
\quad = \hbar(i\cot\theta\cos\varphi\,\partial\varphi + i\sin\varphi\,\partial\theta \\
\qquad - \cot\theta\sin\varphi\,\partial\varphi + \cos\varphi\,\partial\theta) \\
\quad = \hbar e^{i\varphi}(\partial\theta + i\cot\theta\,\partial\varphi) \\
L_- = \hbar e^{-i\varphi}(-\partial\theta + i\cot\theta\,\partial\varphi) \\
L_z = -i\hbar\,\partial\varphi.
\end{cases}
$$

ここから球面調和関数を導く。

Y_{lm} を L_z と $\hbar m$ の固有関数と書くと、

$L_z Y_{lm} = \hbar m Y_{lm}$ となる。

$Y_{lm}(\theta,\varphi) = \Phi(\varphi)\cdot\Theta(\theta)$ と変数分離できるとして、

$-i\hbar\partial_\varphi \Phi = \hbar m \Phi$ から

$\Phi = c\,e^{im\varphi}$, 規格化条件 $\int_0^{2\pi} d\varphi |\Phi|^2 = 1$

より $c = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}$

さらに、$\Phi(\varphi)$ は周期関数で $\Phi(\varphi+2\pi) = \Phi(\varphi)$

$\Rightarrow \Phi(\varphi+2\pi) = c\,e^{i2\pi m} = c.$

($m = 0, \pm1, \pm2 \dots$ の整数)

この m が l のときを考えてみよう。($L_+ Y_{ll} = 0$)

その前に、$m \neq l$ のときはどうなるだろうか。

$$L_+ Y_{lm} = \hbar e^{i\varphi}(\partial\theta + i\cot\theta\,\partial\varphi)\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\varphi}\Theta(\theta)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\varphi}\hbar e^{i\varphi}(\partial\theta - m\cot\theta)\Theta(\theta)$$

任意の物理量 $\forall f(\theta)$ をとってみると、

$$L_+[e^{im\varphi}\cdot f(\theta)] = e^{im\varphi}\hbar e^{i\varphi}\left[\frac{df}{d\theta} - m\cot\theta f\right]$$

$$L_-[e^{im\varphi}\cdot f(\theta)] = -e^{im\varphi}\hbar e^{-i\varphi}\left[\frac{df}{d\theta} + m\cot\theta f\right]$$

これらは

$$\frac{d}{d\theta} = \frac{d\cos\theta}{d\theta}\frac{d}{d\cos\theta} = -\sin\theta\frac{d}{d\cos\theta}.$$

であるから、

$$L_+[e^{im\varphi} f] = -\hbar e^{i(m+1)\varphi}\sin^{(m+1)}\theta\frac{d}{d\cos\theta}[\sin^{-m}\theta f]$$

$$L_-[e^{im\varphi} f] = \hbar e^{i(m-1)\varphi}\sin^{-(m-1)}\theta\frac{d}{d\cos\theta}[\sin^{m}\theta f]$$

となって、k 回 $L_\pm$ を作用させたものは、

$$L_+^k[e^{im\varphi} f] = (-\hbar)^k e^{i(m+k)\theta}\sin^{(m+k)}\theta\left(\frac{d}{d\cos\theta}\right)^k \cdot(\sin^{-m}\theta f.)$$

$$L_-^k[e^{im\varphi} f] = (\hbar)^k e^{i(m-k)\varphi}\sin^{-(m-k)}\theta\left(\frac{d}{d\cos\theta}\right)^k \cdot(\sin^{m}\theta f)$$