5/19(水) 量子力学3 5/15(金)授業まとめ

学籍番号 20121084[illegible] 名前 桶川 俊貴

- 球面調和関数

角運動量 $\vec{L}$ を極座標系で表すことを考える。
そこで、まず、カーテシアン座標系 (x, y, z) における基本ベクトルを、$\vec{e}_x$、$\vec{e}_y$、$\vec{e}_z$、極座標系における基本ベクトルを、$\vec{e}_r$、$\vec{e}_\theta$、$\vec{e}_\varphi$ とすると、

$$\vec{e}_r \cdot \vec{e}_\theta = \vec{e}_\theta \cdot \vec{e}_\varphi = \vec{e}_\varphi \cdot \vec{e}_r = 0$$

である。
ここで、位置ベクトル $\vec{r}$ は、

$$\vec{r} = \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} r\sin\theta\cos\varphi \\ r\sin\theta\sin\varphi \\ r\cos\theta \end{pmatrix}$$

と表すことができるので、

$$T \equiv (\vec{e}_r, \vec{e}_\theta, \vec{e}_\varphi) = \left(\frac{\partial_r \vec{r}}{h_r}, \frac{\partial_\theta \vec{r}}{h_\theta}, \frac{\partial_\varphi \vec{r}}{h_\varphi} \right) = \begin{pmatrix} \sin\theta\cos\varphi & \cos\theta\cos\varphi & -\sin\varphi \\ \sin\theta\sin\varphi & \cos\theta\sin\varphi & \cos\varphi \\ \cos\theta & -\sin\theta & 0 \end{pmatrix}$$

$$h_r = |\partial_r \vec{r}| = \sqrt{\sin^2\theta\cos^2\varphi + \sin^2\theta\sin^2\varphi + \cos^2\theta} = 1$$

$$h_\theta = |\partial_\theta \vec{r}| = \sqrt{r^2\cos^2\theta\cos^2\varphi + r^2\cos^2\theta\sin^2\theta + r^2\sin^2\theta} = r$$

$$h_\varphi = |\partial_\varphi \vec{r}| = \sqrt{r^2\sin^2\theta\sin^2\varphi + r^2\sin^2\theta\cos^2\varphi + 0^2} = r\sin\theta$$

と定義する。

$$\tilde{T}T = \begin{pmatrix} \tilde{\vec{e}}_r \\ \tilde{\vec{e}}_\theta \\ \tilde{\vec{e}}_\varphi \end{pmatrix} (\vec{e}_r \ \vec{e}_\theta \ \vec{e}_\varphi) = E_3$$

$$\tilde{T} = T^{-1}$$

である。一方、

$$\begin{pmatrix} \partial_r \\ \partial_\theta \\ \partial_\varphi \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \partial_r x & \partial_r y & \partial_r z \\ \partial_\theta x & \partial_\theta y & \partial_\theta z \\ \partial_\varphi x & \partial_\varphi y & \partial_\varphi z \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \partial_x \\ \partial_y \\ \partial_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} h_r & 0 & 0 \\ 0 & h_\theta & 0 \\ 0 & 0 & h_\varphi \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{\vec{e}}_r \\ \tilde{\vec{e}}_\theta \\ \tilde{\vec{e}}_\varphi \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \partial_x \\ \partial_y \\ \partial_z \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} h_r & 0 & 0 \\ 0 & h_\theta & 0 \\ 0 & 0 & h_\varphi \end{pmatrix} \tilde{T} \cdot \vec{\nabla}$$

したがって、逆に解いて、

$$\vec{\nabla} = \begin{pmatrix} 1/h_r & 0 & 0 \\ 0 & 1/h_\theta & 0 \\ 0 & 0 & 1/h_\varphi \end{pmatrix} T \begin{pmatrix} \partial_r \\ \partial_\theta \\ \partial_\varphi \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1/r & 0 \\ 0 & 0 & 1/r\sin\theta \end{pmatrix} (\vec{e}_r, \vec{e}_\theta, \vec{e}_\varphi) \begin{pmatrix} \partial_r \\ \partial_\theta \\ \partial_\varphi \end{pmatrix}$$

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

となる。ここで、$\vec{r} = r\vec{e}_r$ であるから、角運動量 $\vec{L}$ は、

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

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

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

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

である。

続いて、

$$L_+ = L_x + iL_y = (i\hbar \sin\varphi\, \partial_\theta + i\hbar \cot\theta \cos\varphi\, \partial_\varphi) + i(-i\hbar\cos\varphi\, \partial_\theta + i\hbar\cot\theta \sin\varphi\, \partial_\varphi)$$

$$= \hbar(i\sin\varphi + \cos\varphi)\partial_\theta + \hbar(i\cos\varphi - \sin\varphi)\cot\theta\, \partial_\varphi$$

$$= \hbar e^{i\phi}\partial_\theta + \hbar i(i\sin\phi + \cos\varphi)\cot\theta\, \partial_\varphi$$

$$= \hbar e^{i\varphi}\partial_\theta + \hbar i e^{i\phi}\cot\theta\, \partial\varphi$$

$$= \hbar e^{i\phi}(\partial_\theta + i\cot\theta\, \partial_\varphi)$$

$$L_- = L_x - iL_y = (i\hbar\sin\varphi\, \partial_\theta + i\hbar\cot\theta\cos\varphi\, \partial\varphi) - i(-i\hbar\cos\varphi\, \partial_\theta + i\hbar\cot\theta\sin\varphi\, \partial\varphi)$$

$$= \hbar(i\sin\varphi - \cos\varphi)\partial_\theta + (i\cos\varphi + \sin\varphi)\partial\varphi$$

$$= \hbar e^{-i\phi}(-\partial_\theta + i\cot\theta\, \partial\varphi).$$

$$L_z = -i\hbar\, \partial\varphi$$

となる。

次に、次の関係を満たす関数 $Y_{\ell m}(\theta, \varphi)$ を求める。

$$L^2 Y_{\ell m}(\theta, \varphi) = \hbar^2 \ell(\ell+1) Y_{\ell m}(\theta, \varphi) \quad \cdots ①$$

$$L_z Y_{\ell m}(\theta, \varphi) = \hbar m Y_{\ell m}(\theta, \varphi) \quad \cdots ②$$

$$L_+ Y_{\ell\ell}(\theta, \varphi) = L_- Y_{\ell\ell}(\theta, \varphi) = 0 \quad \cdots ③$$

$Y_{\ell m}(\theta, \varphi) = Y_{\ell m}(\Omega)$ と、$Y(\Omega) = \Theta(\theta)\cdot\Phi(\varphi)$ と変数分離の形に表すと、②より、

$$L_z \Theta(\theta)\Phi(\varphi) = \hbar m \Theta(\theta)\Phi(\varphi)$$

$$\Leftrightarrow -i\hbar\, \partial\varphi\, \Phi(\varphi) = \hbar m \Phi(\varphi)$$

$$\Leftrightarrow \partial\varphi\, \Phi(\varphi) = im\Phi(\varphi)$$

$$\therefore \Phi(\varphi) = A e^{im\Phi}.$$

ここで、次を要求すると、

$$\int_0^{2\pi} d\phi |\Phi(\varphi)|^2 = 1.$$

$$\Leftrightarrow A^2 \int_0^{2\pi} d\Phi\, e^{2im\Phi} = A^2 \cdot 2\pi = 1.$$

$$\therefore A = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}. \quad (A\text{は正の数と選んだ}).$$

よって、

$$\Phi(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\Phi}$$

また、関数の一価性から、$e^{i2\pi m} = 1$ であり、mは整数である。また、ℓも0以上の整数である。

ここで、θの任意の関数 $f(\theta)$ に対して、

$$L_+\{e^{im\Phi}f(\theta)\} = \hbar e^{i\varphi}(\partial_\theta + i\cot\theta\,\partial_\varphi)\{e^{im\varphi}f(\theta)\}$$
$$= \hbar e^{i\phi}\left(e^{im\varphi}\frac{df(\theta)}{d\theta} + i\cot\theta\cdot im\,e^{im\varphi}f(\theta)\right)$$
$$= e^{im\varphi}\hbar e^{i\varphi}\left(\frac{df(\theta)}{d\theta} - mf(\theta)\cot\theta\right)$$

$$L_-\{e^{im\varphi}f(\theta)\} = \hbar e^{-i\varphi}(\partial_\theta + i\cot\theta\,\partial_\varphi)\{e^{im\varphi}f(\theta)\}$$
$$= -e^{im\varphi}\hbar e^{-i\varphi}\left(\frac{df(\theta)}{d\theta} + mf(\theta)\cot\theta\right)$$

であるが、

$$\frac{d}{d\theta} = \frac{d\cos\theta}{d\theta}\cdot\frac{d}{d\cos\theta} = -\sin\theta\frac{d}{d\cos\theta}$$
$$\frac{d\sin\theta}{d\cos\theta} = \frac{d(1-\cos^2\theta)^{1/2}}{d\cos\theta} = \frac{1}{2}(1-\cos^2\theta)^{-1/2}\cdot(-2\cos\theta) = -\cot\theta$$

なので、次のように書き直せる。

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

これをk回くり返せば

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

となる。
次に、まず $Y_{\ell\ell}$ を求める。③より

$$L_+Y_{\ell\ell} = 0 \Leftrightarrow \hbar e^{i\varphi}(\partial_\theta + i\cot\theta\,\partial_\varphi)\Theta_{\ell\ell}(\theta)\,\Phi_\ell(\varphi) = 0$$
$$\Leftrightarrow \hbar e^{i\varphi}(\partial_\theta + i\cot\theta\,\partial_\varphi)\Theta(\theta)\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{i\ell\varphi} = 0$$
$$\Leftrightarrow \hbar e^{i\varphi}\left(\frac{\partial\Theta(\theta)}{\partial\theta}\cdot\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{i\ell\varphi} - \ell\cot\theta\,\Theta(\theta)\cdot\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{i\ell\varphi}\right) = 0$$

$$\therefore \frac{\partial\Theta(\theta)}{\partial\theta} - \ell\cot\theta = 0$$

よって、この微分方程式の解は、

$$\Theta_{\ell\ell}(\theta) = C_\ell\sin^\ell\theta$$

と書ける。ここで、規格化条件から C_ℓ を導びく。(ただし、$C_\ell = (-1)^\ell C_\ell'$, $C_\ell>0$ とえらぶ)

$$\int_0^\pi \sin\theta\,|\Theta_{\ell\ell}(\theta)|^2 d\theta = 1$$
$$C_\ell^2\int_0^\pi \sin^{2\ell+1}\theta\,d\theta = 1$$
$$\therefore C_\ell = (-1)^\ell\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\sqrt{\frac{(2\ell+1)!}{2}}\cdot\frac{1}{2^\ell\ell!}\times e^{i\ell\varphi}\sin^\ell\theta$$

とわかる。

そして、$|ll\rangle$ に下降演算子 L_- を作用させることを考えると、

$$L_-|ll\rangle = \hbar\sqrt{(l+l)(l-l+1)}\ |l\,l-1\rangle = \hbar\sqrt{2l\times 1}\,|l.l-1\rangle$$

$$L_-^2|ll\rangle = \hbar^2\sqrt{(l+l)(l+l-1)(l-l+1)(l-l+2)} = \hbar^2\sqrt{2l\cdot(2l-1)\times 1\times 2}$$

$$\vdots$$

$$L_-^l|l.l\rangle = \hbar^l\sqrt{\frac{2l!}{l!}\cdot l!}\,|l0\rangle$$

となるから、

$$|l0\rangle = \hbar^{-l}\cdot\sqrt{\frac{l!}{(2l)!}\cdot\frac{1}{l!}}\ L_-^l\,|l.l\rangle \quad ④$$

である。

ここで、

$$L_- Y_{lm} = \hbar e^{-i\varphi}(\partial_\theta + \cot\theta\,\partial_\varphi)\cdot Y_{lm}$$

$$= \hbar e^{-i\varphi}\sin^{-(m-1)}\theta\ \frac{d}{d\cos\theta}\sin^m\theta\,Y_{lm} \quad ⑤$$

であり、$n=k$ のとき、

$$L_-^k Y_{lm} = \hbar^k e^{-ik\varphi}\sin^{-(m-k)}\theta\ \frac{d^k}{d\cos\theta^k}\sin^m\theta\,Y_{lm} \quad ⑥$$

が成り立っていると仮定すると、$n=k+1$ の時、

$$L_-^{k+1}Y_{lm} = L_-(L^k Y_{lm})$$

$$= L_-\left(\hbar^k e^{-ik\varphi}\sin^{-(m-k)}\theta\ \frac{d^k}{d\cos^k\theta}\sin^m Y_{lm}\right)$$

$$= \hbar^{k+1}e^{-i\varphi}(\partial_\theta + \cot\partial_\varphi)\left(e^{-ik\varphi}\sin^{-(m-k)}\theta\ \frac{d^k}{d\cos^k\theta}\sin^m\theta\,Y_{lm}\right)$$

$$= \hbar^{k+1}e^{-i(k+1)\varphi}\left\{\partial_\theta + \cos\theta(k-m)\cdot\cot\theta\right\}\left(\sin^{-(m-k)}\theta\ \frac{d^k}{d\cos^k\theta}\sin^m Y_{lm}\right)$$

$$= \hbar^{k+1}e^{-i(k+1)\varphi}\sin^{-(m-k-1)}\theta\ \frac{d^{k+1}}{d\cos^{k+1}\theta}\sin^m\theta\,Y_{lm} \cdots ⑦$$

よって、④.⑤.⑦ より、

$$L_-^n Y_{lm} = \hbar^n e^{-in\varphi}\sin^{-(m-n)}\theta\ \frac{d^n}{d\cos^n\theta}\sin^m\theta\,Y_{lm} \cdots ⑧$$

である。⑧で、$n=m=l$ として、④に代入すると、

$$|l0\rangle = \hbar^{-l}\sqrt{\frac{l!}{(2l!)}\cdot\frac{1}{l!}}\cdot\hbar^l e^{-il\varphi}\sin^{-(l-l)}\theta\ \frac{d^l}{d\cos^l\theta}\sin^l\theta\,Y_{ll}$$

$$= \sqrt{\frac{l!}{(2l!)}\cdot\frac{1}{l!}}\cdot e^{-il\varphi}\cdot\frac{d^l}{d\cos^l\theta}\sin^l\theta\,Y_{ll}$$

$$= (-1)^l\cdot\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\sqrt{\frac{(2l+1)!}{2}}\cdot\frac{1}{2^l l!}\cdot\sqrt{\frac{l!}{(2l!)}\cdot\frac{1}{l!}}\ e^{il\varphi}\cdot e^{-il\varphi}\cdot\frac{d^l}{d\cos^l\theta}\sin^{2l}\theta$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\sqrt{\frac{2l+1}{2}}\cdot\frac{1}{2^l l!}\ \frac{d^l}{d\cos^l\theta}(-\sin^2\theta)^l$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\sqrt{\frac{2l+1}{2}}\cdot\frac{1}{2^l l!}\ \frac{d^l}{d\cos^l\theta}(\cos^2\theta-1)^l \quad \cdots ⑨$$

ここで、

$$P_l(t) = \frac{1}{2^l l!}\frac{d^l}{dt^l}(t^2-1)^l \quad \cdots ⑩$$

を l 次のルジャンドル多項式といい、⑩で、$t=\cos\theta$ として、⑨に代入すると、

$$Y_{l0}(\Omega) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}\ P_l(\cos\theta)$$

となる。

次に、$m>0$ に対して、Y_{lm} は、

$$|l, m-1\rangle = \hbar^{-1}\sqrt{(l+m)(l-m+1)}\ L_-|lm\rangle.$$

$$|l, m-2\rangle = \hbar^{-2}\sqrt{(l+m)(l+m-1)(l-m+1)(l-m+2)}\ L_-^2|lm\rangle.$$

$$\vdots$$

$$|l, 0\rangle = \hbar^{-m}\sqrt{\frac{(l+m)!}{l!}\cdot\frac{l!}{(l-m)!}}\ L_-^m|lm\rangle$$

となるから

$$Y_{lm} = \hbar^m\sqrt{\frac{l!}{(l+m)!}\cdot\frac{(l-m)!}{l!}}\ Y_{l0}.$$

$$= (-1)^m\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}\ \frac{(l-m)!}{(l+m)!}}\ \sin^m\theta\ \frac{d^m}{d\cos^m\theta}\ P_l(\cos\theta)\cdot e^{im\varphi}$$

次に、$m' = -m$ $(m>0)$ に対して、$Y_{lm'} = Y_{l-m}$ は、同様にして、

$$Y_{lm'} = \hbar^{-m}\sqrt{\frac{(l-m)!}{l!}\cdot\frac{l!}{(l-m)!}}\ L_-^m Y_{l0}.$$

$$= \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}\cdot\frac{(l-m)!}{(l+m)!}}\ \sin^m\theta\ \frac{d^m}{d\cos^m\theta}\ P_l(\cos\theta)\ e^{-im\varphi}.$$

そして、Θ_{lm} と Θ_{l-m} との関数は、

$$\Theta_{lm} = (-1)^m\,\Theta_{l-m}$$

の関係があるから、

$$Y_{lm}^* = (-1)^m\,Y_{l-m}.$$

となる。このような Y_{lm} を球面調和関数という。