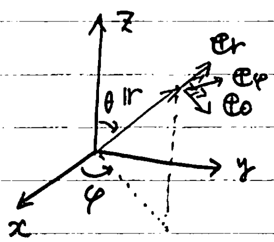
量子力学3 第7回講義まとめ

201310851 金杉 翔太

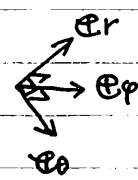
☆球面調和関数 (Spherical harmonics)

3次元極座標を考える。



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

r, θ, φ 方向の単位ベクトル $\mathbb{e}_r, \mathbb{e}_\theta, \mathbb{e}_\varphi$ は右手系を成している。



$$\begin{cases} \mathbb{e}_r \times \mathbb{e}_\theta = \mathbb{e}_\varphi \\ \mathbb{e}_\theta \times \mathbb{e}_\varphi = \mathbb{e}_r \\ \mathbb{e}_\varphi \times \mathbb{e}_r = \mathbb{e}_\theta \\ \mathbb{e}_r\cdot\mathbb{e}_r = \mathbb{e}_\theta\cdot\mathbb{e}_\theta = \mathbb{e}_\varphi\cdot\mathbb{e}_\varphi = 1 \\ \mathbb{e}_r\cdot\mathbb{e}_\theta = \mathbb{e}_\theta\cdot\mathbb{e}_\varphi = \mathbb{e}_\varphi\cdot\mathbb{e}_r = 0 \end{cases}$$

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

行列Tを上のように定義すると、

$$\tilde{T}T = \begin{pmatrix} \tilde{\mathbb{e}}_r \\ \tilde{\mathbb{e}}_\theta \\ \tilde{\mathbb{e}}_\varphi \end{pmatrix} (\mathbb{e}_r\ \mathbb{e}_\theta\ \mathbb{e}_\varphi) = \begin{pmatrix} \tilde{\mathbb{e}}_r\mathbb{e}_r & \tilde{\mathbb{e}}_r\mathbb{e}_\theta & \tilde{\mathbb{e}}_r\mathbb{e}_\varphi \\ \tilde{\mathbb{e}}_\theta\mathbb{e}_r & \tilde{\mathbb{e}}_\theta\mathbb{e}_\theta & \tilde{\mathbb{e}}_\theta\mathbb{e}_\varphi \\ \tilde{\mathbb{e}}_\varphi\mathbb{e}_r & \tilde{\mathbb{e}}_\varphi\mathbb{e}_\theta & \tilde{\mathbb{e}}_\varphi\mathbb{e}_\varphi \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = E_3$$

となり、$\tilde{T} = T^{-1}$ となるので、Tは直交行列となることが分かる。

$$\begin{pmatrix} \partial_r \\ \partial_\theta \\ \partial_\varphi \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial x}{\partial r} & \frac{\partial y}{\partial r} & \frac{\partial z}{\partial r} \\ \frac{\partial x}{\partial \theta} & \frac{\partial y}{\partial \theta} & \frac{\partial z}{\partial \theta} \\ \frac{\partial x}{\partial \varphi} & \frac{\partial y}{\partial \varphi} & \frac{\partial z}{\partial \varphi} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \partial_x \\ \partial_y \\ \partial_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \widetilde{\partial_r\mathbb{r}} \\ \widetilde{\partial_\theta\mathbb{r}} \\ \widetilde{\partial_\varphi\mathbb{r}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \partial_x \\ \partial_y \\ \partial_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \tilde{\mathbb{e}}_r \\ r\tilde{\mathbb{e}}_\theta \\ r\sin\theta\,\tilde{\mathbb{e}}_\varphi \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \partial_x \\ \partial_y \\ \partial_z \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & r & 0 \\ 0 & 0 & r\sin\theta \end{pmatrix} \tilde{T} \begin{pmatrix} \partial_x \\ \partial_y \\ \partial_z \end{pmatrix}$$

$\tilde{T} = T^{-1}$ であることより、

$$\begin{pmatrix} \partial_x \\ \partial_y \\ \partial_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1/r & 0 \\ 0 & 0 & 1/r\sin\theta \end{pmatrix} T \begin{pmatrix} \partial_r \\ \partial_\theta \\ \partial_\varphi \end{pmatrix}$$

$$\therefore \nabla = \mathbb{e}_r\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}\mathbb{e}_\theta\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{r\sin\theta}\mathbb{e}_\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi} \quad \text{—— ①}$$

①を用いると角運動量演算子 $\mathbb{L}=\mathbb{r}\times\mathbb{p}$ は、

$$
\begin{aligned}
\mathbb{L} &= \mathbb{r}\times\mathbb{p} \\
&= r\mathbb{e}_r\times(-i\hbar\nabla) \\
&= r\mathbb{e}_r\times(-i\hbar)\left(\mathbb{e}_r\partial_r + \frac{1}{r}\mathbb{e}_\theta\partial_\theta + \frac{1}{r\sin\theta}\mathbb{e}_\varphi\partial_\varphi\right) \\
&= -i\hbar\left(\mathbb{e}_\varphi\partial_\theta - \mathbb{e}_\theta\frac{1}{\sin\theta}\partial_\varphi\right) \\
&= i\hbar\frac{1}{\sin\theta}\mathbb{e}_\theta\partial_\varphi - i\hbar\mathbb{e}_\varphi\partial_\theta \\
&= i\hbar\begin{pmatrix}\cot\theta\cos\varphi \\ \cot\theta\sin\varphi \\ -1\end{pmatrix}\partial_\varphi - i\hbar\begin{pmatrix}-\sin\varphi \\ \cos\varphi \\ 0\end{pmatrix}\partial_\theta
\end{aligned}
$$

よって、

$$
\begin{aligned}
L_+ &= L_x + iL_y \\
&= \hbar(i\cot\theta\cos\varphi\,\partial_\varphi + i\sin\varphi\,\partial_\theta - \cot\theta\sin\varphi\,\partial_\varphi + \cos\varphi\,\partial_\theta) \\
&= \hbar e^{i\varphi}(\partial_\theta + i\cot\theta\,\partial_\varphi) \quad \text{— ②} \\
L_- &= L_x - iL_y \\
&= \hbar e^{-i\varphi}(-\partial_\theta + i\cot\theta\,\partial_\varphi) \quad \text{— ③} \\
L_z &= -i\hbar\partial_\varphi \quad \text{— ④}
\end{aligned}
$$

となる。前回の議論から、

$$L_z|l,m\rangle = \hbar m|l,m\rangle$$

に対応させて、

$$L_z Y_{lm}(\theta,\varphi) = \hbar m Y_{lm}(\theta,\varphi) \quad \text{— ⑤}$$

を考える。ここで、$Y_{lm}(\theta,\varphi)=\Theta(\theta)\Phi(\varphi)$ と仮定すると、④.⑤より、

$$-i\hbar\partial_\varphi\Phi(\varphi) = \hbar m\Phi(\varphi)$$

$$\therefore \Phi(\varphi) = Ce^{im\varphi}$$

規格化条件 $\int_0^{2\pi}|\Phi|^2d\varphi=1$ と、$\Phi(\varphi)=\Phi(\varphi+2\pi)$ を用いると、

$$\Phi(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\varphi} \quad (m=0,\pm1,\pm2,\dots\dots) \quad \text{— ⑥}$$

と求まる。同様に前回の議論から、$L_+Y_{ll}(\theta,\varphi)=0$, $L_-Y_{l,-l}(\theta,\varphi)=0$ となるので、$L_+Y_{lm}(\theta,\varphi)$、$L_-Y_{lm}(\theta,\varphi)$ について考えてみる。⑥より、

$$Y_{lm}(\theta,\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\varphi}\Theta(\theta) \quad \text{— ⑦}$$

である。但し、$m\in\mathbb{Z}$ となる。これと②を用いると、

$$L_+ Y_{\ell m}(\theta,\varphi) = \frac{\hbar}{\sqrt{2\pi}} e^{i(m+1)\varphi}\left[\partial_\theta - m\cot\theta\right]\Theta(\theta)$$

より一般に任意の関数 $f(\theta)$ に対して.

$$L_+[e^{im\varphi} f(\theta)] = \hbar e^{i(m+1)\varphi}\left[\frac{df}{d\theta} - m\cot\theta\, f(\theta)\right]$$

$$L_-[e^{im\varphi} f(\theta)] = -\hbar e^{i(m-1)\varphi}\left[\frac{df}{d\theta} + m\cot\theta\, f(\theta)\right]$$

ここで、$\theta \to \cos\theta$ へ変数変換を行うと、

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

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

であるから、

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

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

これより、$k=0,1,2,\cdots$ に対して.

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

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

という式が得られる。