No.

Date . 5 . 29

201810876 野村由仁香

1. Γ関数とB関数

- $\Gamma(z) = \int_0^\infty dt\, e^{-t} t^{z-1}$ $\quad (\mathrm{Re}\, z > 0)$

$\Gamma(z+1) = z\Gamma(z)$

$\Gamma(1) = 1$

$\Gamma(\frac{1}{2}) = \pi^{\frac{1}{2}}$

$\Gamma(n) = (n-1)!$ $\quad n = 1, 2, 3, \dots$

- $B(x, y) = \int_0^1 dt\, t^{x-1}(1-t)^{y-1}$ $\quad (\mathrm{Re}\, x > 0, \mathrm{Re}\, y > 0)$

$= B(y, x)$

変数変換

$= 2\int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta\, \sin^{2x-1}\theta \cos^{2y-1}\theta = \int_0^\infty du \frac{u^{x-1}}{(1+u)^{x+y}}$

$B(x, y) = \frac{\Gamma(x)\Gamma(y)}{\Gamma(x+y)}$, $\quad \Gamma(z)\Gamma(1-z) = \frac{\pi}{\sin \pi z}$ $\quad (0 < z < 1)$

など…

2. 球面調和関数の導出

○ Y_{ll} の決定

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

$Y_{lm}(\Omega) = \Theta_{lm}(\theta)\Phi_m(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\phi}\Theta_{lm}(\theta)$

$L_+ Y_{ll} = 0$ から Θ_{ll} が満たす方程式を書けば、

$$\frac{\partial\Theta_{ll}}{\partial\theta} - l\cot\theta\,\Theta_{ll} = 0$$

この解は $\Theta_{ll} = C_l \sin^l\theta$ とおける。 $\quad \frac{d}{d\theta}\sin^l\theta = l\sin^{l-1}\theta\cos\theta = l\sin^l\theta\cot\theta$

規格化条件

$\int_0^\pi d\theta\, \sin\theta\, |\Theta_{ll}(\theta)|^2 = 1$ より 定数 C_l を決定する

$\rightarrow C_l = (-1)^l \sqrt{\frac{(2l+1)!}{2}} \frac{1}{2^l l!}$ $\quad$ ただし、$(-1)^l \times$(正の部分)となるように符号を選んだ

$$\rightarrow Y_{ll}(\Omega) = (-1)^l \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\sqrt{\frac{(2l+1)!}{2}} \cdot \frac{1}{2^l l!} e^{il\phi}\sin^l\theta$$

$\boxed{\text{規格化条件}}$ $\int_0^\pi d\theta \sin\theta\, |\Theta_{ll}(\theta)|^2 = C_l^2 \int_0^\pi \sin^{2l+1}\theta\, d\theta = C_l^2 \int_0^1 d(-\cos\theta)\,(1-\cos^2\theta)^l$

$(-\cos\theta = t) \rightarrow \quad = 2C_l^2 \int_0^1 dt\,(1-t^2)^l$

$t = s^{\frac{1}{2}} \rightarrow \quad = C_l^2 \int_0^1 ds\, s^{-\frac{1}{2}}(1-s)^l = C_l^2\, B(\tfrac{1}{2}, l+1)$

$$= C_l^2 \frac{\Gamma(\frac{1}{2})\Gamma(l+1)}{\Gamma(l+\frac{3}{2})} = C_l^2 \frac{\Gamma(\frac{1}{2})\, l!}{(l+\frac{1}{2})\cdots(\frac{1}{2})\Gamma(\frac{1}{2})} = C_l^2 \frac{2^{l+1}\, l!}{1\cdot 3 \cdots (2l+1)}$$

$$= C_l^2 \frac{2^{l+1}\, l!\,(2^l l!)}{(2l+1)!} = C_l^2 \frac{(2^l\, l!)^2}{(2l+1)!}\cdot 2$$

Date

。Y_{l0}の決定

$$|jm-k\rangle = \hbar^{-k}\left[\frac{(j+m-k)!}{(j+m)!}\frac{(j-m)!}{(j-(m-k))!}\right]^{\frac{1}{2}}(J_-)^k|jm\rangle$$ の $j=m=k=l$ を考える.

$$\to |l0\rangle = \hbar^{-l}\left[\frac{l!}{(2l)!}\frac{l!}{l!}\right]^{\frac{1}{2}}(L_-)^l|ll\rangle$$

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

$$\to L_-^l[e^{il\phi}\sin^l\theta] = \hbar^l\left(\frac{d}{d\cos\theta}\right)^l\sin^{2l}\theta$$

$$\Rightarrow Y_{l0} = \hbar^{-l}\sqrt{\frac{l!}{(2l)!}\frac{1}{l!}}L_-^lY_{ll} = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}P_l(\cos\theta)$$

$\downarrow$

l次のルジャンドル多項式 $\quad P_l(t) = \frac{1}{2^l l!}\frac{d^l}{dt^l}(t^2-1)^l \quad$ ロドリグスの公式

。Y_{lm}の決定 $\quad(m\geqq0)$

$$|jm+k\rangle = \hbar^{-k}\left[\frac{(j+m)!}{(j+m+k)!}\frac{(j-(m+k))!}{(j-m)!}\right]^{\frac{1}{2}}(J_+)^k|jm\rangle$$, $j=l$, $m=0$, $k=m$ を考える

$$\to |lm\rangle = \hbar^{-m}\left[\frac{l!}{(l+m)!}\cdot\frac{(l-m)!}{l!}\right]^{\frac{1}{2}}L_+^m|l0\rangle$$

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

$$\to L_+^m[P_l] = (-\hbar)^m e^{im\phi}\sin^m\theta\left(\frac{d}{d\cos\theta}\right)^m P_l$$

$m>0$ に対して Y_{lm} を求めれば、$Y_{lm} = \hbar^{-m}\left[\frac{l!}{(l+m)!}\frac{(l-m)!}{l!}\right]^{\frac{1}{2}}L_+^m Y_{l0}$ より.

$$Y_{lm}(\Omega) = (-)^m\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}\frac{(l-m)!}{(l+m)!}}\sin^m\theta\left[\frac{d}{d\cos\theta}\right]^m P_l(\cos\theta)e^{im\phi}$$

No.

Date

○ $Y_{lm'}$の決定 ($m' = -m,\ m \geq 0$)

$$|jm-k\rangle = \hbar^{-k}\left[\frac{(j+m-k)!}{(j+m)!}\frac{(j-m)!}{(j-(m-k))!}\right]^{\frac{1}{2}}(J_-)^k|jm\rangle \qquad j=l,\ m=0,\ k=m \text{ と考える}$$

$$\rightarrow |l-m\rangle = \hbar^{-m}\left[\frac{(l-m)!}{l!}\frac{l!}{(l+m)!}\right]^{\frac{1}{2}} L_-^m |l0\rangle$$

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

$$\rightarrow L_-^m[P_l] = \hbar^m e^{-im\phi}\sin^m\theta\left(\frac{d}{d\cos\theta}\right)^m P_l$$

$m' = -m,\ m \geq 0$ に対して $Y_{lm'} = Y_{l-m}$ を求めれば、$Y_{l-m} = \hbar^{-m}\sqrt{\frac{(l-m)!}{l!}\frac{l!}{(l+m)!}}\ L_-^m Y_{l0}$ より

$$Y_{lm'}(\Omega) = Y_{l-m}(\Omega) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}\frac{(l-m)!}{(l+m)!}}\sin^m\theta\left[\frac{d}{d\cos\theta}\right]^m P_l(\cos\theta)\, e^{-im\phi}$$

$$\rightarrow Y_{lm}^* = (-)^m Y_{l-m}$$

3. まとめ

軌道角運動量 $\mathbb{L} = \mathbb{r}\times\mathbb{p} = -i\hbar\left(e_\phi\partial_\theta - e_\theta\frac{1}{\sin\theta}\partial_\phi\right)$

→ 球面調和関数

$$\mathbb{L}^2 Y_{lm} = \hbar l(l+1)Y_{lm}$$
$$L_z Y_{lm} = \hbar m Y_{lm}$$
$$L_+ Y_{ll} = L_- Y_{l-l} = 0$$

$$Y_{lm} = (-)^{\frac{1}{2}(m+|m|)}\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}\frac{l-|m|}{l+|m|}}\sin^{|m|}\theta\left[\frac{d}{d\cos\theta}\right]^{|m|}P_l(\cos\theta)\,e^{im\phi}$$
$$= (-)^{\frac{1}{2}(m+|m|)}\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}\frac{l-|m|}{l+|m|}}\,P_l^{|m|}(\cos\theta)\,e^{im\phi}$$

$$\frac{1}{2}(m+|m|) = \begin{cases} m & (m\geq 0) \\ 0 & (m<0)\end{cases}$$

Legendre多項式

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

Legendreの陪関数

$$P_l^{|m|}(t) = (1-t^2)^{\frac{|m|}{2}}\frac{d^{|m|}}{dt^{|m|}}P_l(t)$$

4. 全角運動量演算子とルジャンドル陪関数

全角運動量 $\mathbb{L}^2$ について考える。

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

$$\mathbf{e}_\theta = \begin{pmatrix} \cos\phi\cos\theta \\ \sin\phi\cos\theta \\ -\sin\theta \end{pmatrix} \quad \mathbf{e}_\phi = \begin{pmatrix} -\sin\phi \\ \cos\phi \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\partial_\theta \mathbf{e}_\theta = \begin{pmatrix} -\cos\phi\sin\theta \\ -\sin\phi\sin\theta \\ -\cos\theta \end{pmatrix} \quad \partial_\phi \mathbf{e}_\phi = \begin{pmatrix} -\cos\phi \\ -\sin\phi \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\partial_\phi \mathbf{e}_\theta = \begin{pmatrix} -\sin\phi\cos\theta \\ \cos\phi\cos\theta \\ 0 \end{pmatrix} \quad \partial_\theta \mathbf{e}_\phi = 0 \quad \mathbf{e}_\theta\cdot\partial_\phi\mathbf{e}_\theta = 0 \quad \mathbf{e}_\phi\cdot\partial_\theta\mathbf{e}_\theta = 0$$

$$\mathbb{L}^2 = -\hbar^2\left(\mathbf{e}_\phi\partial_\theta - \mathbf{e}_\theta\frac{1}{\sin\theta}\partial_\phi\right)\left(\mathbf{e}_\phi\partial_\theta - \mathbf{e}_\theta\frac{1}{\sin\theta}\partial_\phi\right)$$

$$= -\hbar^2\Big[(\mathbf{e}_\phi\cdot\mathbf{e}_\phi)\partial_\theta^2 + \underbrace{(\mathbf{e}_\phi\cdot\partial_\theta\mathbf{e}_\phi)}_{=0}\partial_\theta - \underbrace{(\mathbf{e}_\phi\cdot\mathbf{e}_\theta)}_{=0}\partial_\theta\frac{1}{\sin\theta}\partial_\phi - \underbrace{(\mathbf{e}_\phi\cdot\partial_\theta\mathbf{e}_\theta)}_{=0}\frac{1}{\sin\theta}\partial_\phi$$

$$- \underbrace{(\mathbf{e}_\theta\cdot\mathbf{e}_\phi)}_{=0}\frac{1}{\sin\theta}\partial_\phi\partial_\theta - (\mathbf{e}_\theta\cdot\partial_\phi\mathbf{e}_\phi)\frac{1}{\sin\theta}\partial_\theta + (\mathbf{e}_\theta\cdot\mathbf{e}_\theta)\frac{1}{\sin^2\theta}\partial_\phi^2 + \underbrace{(\mathbf{e}_\theta\cdot\partial_\phi\mathbf{e}_\theta)}_{=0}\frac{1}{\sin^2\theta}\partial_\phi\Big]$$

$$= -\hbar^2\Big[\underbrace{(\mathbf{e}_\phi\cdot\mathbf{e}_\phi)}_{=1}\partial_\theta^2 - \underbrace{(\mathbf{e}_\theta\cdot\partial_\phi\mathbf{e}_\phi)}_{=-\cos\theta}\frac{1}{\sin\theta}\partial_\theta + \underbrace{(\mathbf{e}_\theta\cdot\mathbf{e}_\theta)}_{=1}\frac{1}{\sin^2\theta}\partial_\phi^2\Big]$$

$$= -\hbar^2\left[\partial_\theta^2 + \frac{\cos\theta}{\sin\theta}\partial_\theta + \frac{1}{\sin^2\theta}\partial_\phi^2\right] = -\hbar^2\left[\frac{1}{\sin\theta}\partial_\theta(\sin\theta\,\partial_\theta) + \frac{1}{\sin^2\theta}\partial_\phi^2\right]$$

$\mathbb{L}^2 Y_{\ell m} = \hbar^2\ell(\ell+1)Y_{\ell m}$ より、$Y_{\ell m} = (2\pi)^{-\frac{1}{2}} e^{im\phi}\Theta_{\ell m}(\theta)$ であるから

$$\left[-\frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d}{d\theta}\right) + \frac{m^2}{\sin^2\theta}\right]\Theta_{\ell m} = \ell(\ell+1)\Theta_{\ell m}$$

$$\underline{L}\left[-\frac{d}{d\cos\theta}\left(\sin^2\theta\frac{d}{d\cos\theta}\right) + \frac{m^2}{\sin^2\theta}\right]\Theta_{\ell m}$$

$t = \cos\theta$ として $\left[-\frac{d}{dt}\left((1-t^2)\frac{d}{dt}\right) + \frac{m^2}{1-t^2}\right]P_\ell^m(t) = \ell(\ell+1)P_\ell^m(t)$

→ ルジャンドルの陪関数は次のルジャンドルの陪微分方程式を満たす。

$$\frac{d}{dt}\left((1-t^2)\frac{d}{dt}\right)\frac{dP_\ell^m(t)}{dt} + \left[\ell(\ell+1) - \frac{m^2}{1-t^2}\right]P_\ell^m(t) = 0$$

特に $m=0$ として $\frac{d}{dt}\left((1-t^2)\frac{d}{dt}\right)\frac{dP_\ell(t)}{dt} + \ell(\ell+1)P_\ell(t) = 0$

球面調和関数 $Y_{\ell m}$ と $Y_{\ell' m}$ との直交関係から

$$\frac{2\ell+1}{2}\frac{(\ell-m)!}{(\ell+m)!}\int_{-1}^{1} d(\cos\theta)\,P_{\ell'}^m(\cos\theta)P_\ell^m(\cos\theta) = \delta_{\ell'\ell}$$

$$\to \frac{2\ell+1}{2}\frac{(\ell-m)!}{(\ell+m)!}\int_{-1}^{1} dt\,P_{\ell'}^m(t)P_\ell^m(t) = \delta_{\ell'\ell}$$

特に $m=0$ のとき

$$\frac{2\ell+1}{2}\int_{-1}^{1} dt\,P_{\ell'}(t)P_\ell(t) = \delta_{\ell'\ell}$$

5、多重極展開

ロドリゲスの公式から多重極展開を導く

$$\frac{1}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}=\frac{1}{\sqrt{\mathbf{r}^2+\mathbf{r}'^2-2\mathbf{r}\cdot\mathbf{r}'}}=\frac{1}{r_>}\frac{1}{\sqrt{1-2\left(\frac{r_<}{r_>}\right)\cos\theta+\left(\frac{r_<}{r_>}\right)^2}}=\sum_{l=0}^{\infty}\frac{r_<^l}{r_>^{l+1}}P_l(\cos\theta)$$

$$P_l(t)=\frac{1}{2^l l!}\frac{d^l}{dt^l}(t^2-1)^l=\frac{1}{2^l l!}\frac{l!}{2\pi i}\oint_{C_t^+}d\zeta\frac{(\zeta^2-1)^l}{(\zeta-t)^{l+1}}=\frac{1}{2\pi i}\oint_{C_t^+}d\zeta\left[\frac{\zeta^2-1}{2(\zeta-t)}\right]^l\frac{1}{\zeta-t}$$

グルサの定理

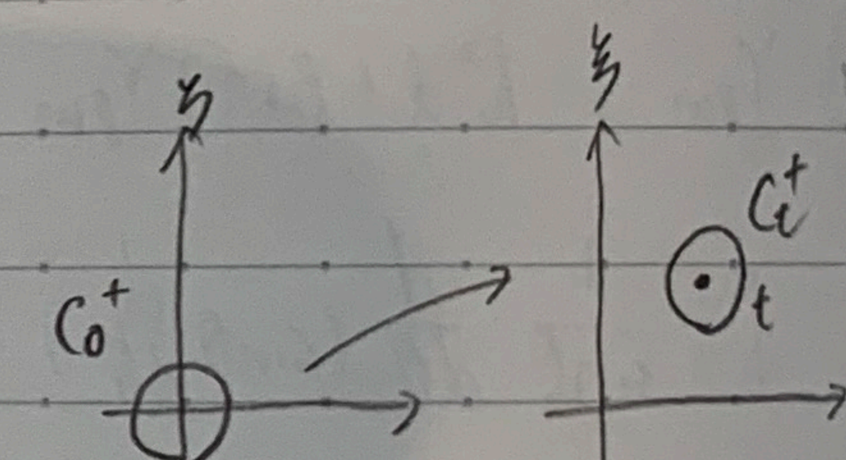
$f(z)=\frac{1}{2\pi i}\oint_{C_z^+}d\zeta\frac{f(\zeta)}{\zeta-z}$ これをn回ビブンして $f^{(n)}(z)=\frac{n!}{2\pi i}\oint_{C_z^+}d\zeta\frac{f(\zeta)}{(\zeta-z)^{n+1}}$:グルサの定理

$\frac{1}{\eta}=\frac{\zeta^2-1}{2(\zeta-t)}$ として $\zeta\to\eta$ の変数変換を考える

$\eta\zeta^2-\eta=2\zeta-2t$, $\eta\zeta^2-2\zeta+2t-\eta=0$ $\zeta=(1\pm\sqrt{1-2t\eta+\eta^2})/\eta$

$\zeta=\frac{1\pm R}{\eta}$ $R=\sqrt{1-2t\eta+\eta^2}$ とかくと.

$\eta\to0$ のとき $R\to1-t\eta+\frac{1}{2}\eta^2$, $\zeta\to\frac{1\pm(1-t\eta+\frac{1}{2}\eta^2)}{\eta}$ なので



$\zeta=\frac{1-R}{\eta}$ の分枝をとれば $\eta\to0$ のとき $\zeta\to t-\frac{1}{2}\eta$

$$\zeta=\frac{1-R}{\eta}\to d\zeta=\frac{-d\eta}{\eta^2}(1-R)-\frac{1}{\eta}\frac{-2t+2\eta}{2R}d\eta=\frac{-R+R^2+t\eta-\eta^2}{\eta^2R}d\eta$$

$$=\frac{-R-t\eta+1}{\eta^2R}d\eta=\frac{\zeta-1}{\eta R}d\eta\qquad\to\frac{d\zeta}{\zeta-t}=\frac{d\eta}{R\eta}$$

よって

$$P_l(t)=\frac{1}{2\pi i}\oint_{C_0^+}d\eta\frac{1}{R\eta^{l+1}}=\frac{1}{l!}\frac{d^l}{d\eta^l}\frac{1}{R}\bigg|_{\eta=0}=\frac{1}{l!}\frac{d^l}{d\eta^l}\frac{1}{\sqrt{1-2t\eta+\eta^2}}\bigg|_{\eta=0}$$

グルサの定理

これは $\frac{1}{R}$ を η の周りでテイラー展開するとみれば.

$$\frac{1}{R}=\frac{1}{\sqrt{1-2t\eta+\eta^2}}=\sum_{l=0}^{\infty}P_l(t)\eta^l$$

これをルジャンドル関数の母関数展開とよぶ

これを用いて

$$\frac{1}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}=\frac{1}{\sqrt{\mathbf{r}^2+\mathbf{r}'^2-2\mathbf{r}\cdot\mathbf{r}'}}=\frac{1}{r_>}\frac{1}{\sqrt{1-2\left(\frac{r_<}{r_>}\right)\cos\theta+\left(\frac{r_<}{r_>}\right)^2}}$$

$$=\sum_{l=0}^{\infty}\frac{r_<^l}{r_>^{l+1}}P_l(\cos\theta)$$

ここで $\mathbf{r}$ と $\mathbf{r}'$ がなす角の大きさが θ であり, $r_>$ は $|\mathbf{r}|$ と $|\mathbf{r}'|$ の大きい方, $r_<$ は小さい方である.