

2020. 5. 29.

◦  $\Gamma$ 関数とB関数.

・  $\Gamma$ 関数.

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

- ・  $\Gamma(z+1) = z \Gamma(z)$
- ・  $\Gamma(1) = 1$ ,  $\Gamma(\frac{1}{2}) = \pi^{1/2}$
- ・  $\Gamma(n) = (n-1)!$  ( $n=1, 2, 3, \dots$ )

$\Gamma$ 関数の性質

・ B関数.

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

$$= B(y, x)$$

$$= 2 \int_0^{\pi/2} d\theta \sin^{2x-1} \theta \cos^{2y-1} \theta$$

$$= \int_0^{\infty} du \frac{u^{x-1}}{(1+u)^{x+y}}$$

異なる表し方がある!

・  $\Gamma$ 関数とB関数が満たす関係式

$$B(x, y) = \frac{\Gamma(x) \Gamma(y)}{\Gamma(x+y)}$$

$$\Gamma(z) \Gamma(1-z) = \frac{\pi}{\sin \pi z} \quad (0 < z < 1)$$

# 。球面調和関数の導出。

・  $Y_{\ell\ell}$  の決定

$$\begin{cases} L_+ [e^{im\phi} f(\theta)] = e^{im\phi} \hbar e^{i\phi} \left[ \frac{df}{d\theta} - m f \cot\theta \right] \\ Y_{\ell m}(\Omega) = \Theta_{\ell m}(\theta) \Phi_{\ell m}(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\phi} \Theta_{\ell m}(\theta) \end{cases}$$

に於いて,  $m = \ell$ ,  $f(\theta) = \Theta_{\ell\ell}(\theta)$  とする。

$$L_+ Y_{\ell\ell} = 0 \text{ より } \frac{df}{d\theta} - m f \cot\theta = 0 \text{ とおける。}$$

$$\frac{d\Theta_{\ell\ell}}{d\theta} - \ell \cot\theta \Theta_{\ell\ell} = 0$$

この解は  $\Theta_{\ell\ell} = C_{\ell} \sin^{\ell}\theta$  とおける。

規格化条件  $\int_0^{\pi} d\theta \sin\theta |\Theta_{\ell\ell}(\theta)|^2 = 1$  より、

$$\begin{aligned} \int_0^{\pi} d\theta \sin\theta |\Theta_{\ell\ell}(\theta)|^2 &= C_{\ell}^2 \int_0^{\pi} d\theta \sin^{2\ell+1}\theta \\ &= 2C_{\ell}^2 \int_0^1 dt (1-t^2)^{\ell} \quad \left\{ \begin{array}{l} -\cos\theta = t \\ t = s^{1/2} \end{array} \right. \\ &= C_{\ell}^2 \int_0^1 ds s^{-1/2} (1-s)^{\ell} \quad \left\{ \begin{array}{l} B(x, y) = \int_0^1 dt t^{x-1} (1-t)^{y-1} \\ B(x, y) = \frac{\Gamma(x)\Gamma(y)}{\Gamma(x+y)} \end{array} \right. \\ &= C_{\ell}^2 \frac{\Gamma(\frac{1}{2})\Gamma(\ell+1)}{\Gamma(\ell+\frac{3}{2})} \quad \left\{ \begin{array}{l} \Gamma(n) = (n-1)! \\ \Gamma(z+1) = z\Gamma(z) \end{array} \right. \\ &= C_{\ell}^2 \frac{\cancel{\Gamma(\frac{1}{2})} \cdot \ell!}{(\ell+\frac{1}{2}) \cdots (\frac{1}{2}) \cancel{\Gamma(\frac{1}{2})}} \quad \left\{ \begin{array}{l} 2\ell+1 \text{ 個の } \frac{1}{2} \text{ の積} \\ (\ell+\frac{1}{2}) \cdots (\frac{1}{2}) = 2^{\ell+1} \ell! \cdot \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{2} \cdots \frac{1}{2} \end{array} \right. \\ &= C_{\ell}^2 \frac{2^{\ell+1} \ell!}{(2\ell+1) \cdots 3 \cdot 1} \\ &= C_{\ell}^2 \frac{2^{\ell+1} \ell! (2^{\ell} \ell!)}{(2\ell+1)!} \\ &= C_{\ell}^2 \frac{(2^{\ell} \ell!)^2 \cdot 2}{(2\ell+1)!} = 1 \end{aligned}$$



•  $Y_{lm}$  の決定 ( $m \geq 0$ )

$$|j, m+k\rangle = \hbar^{-k} \left[ \frac{(j+m)!}{(j+m+k)!} \frac{(j-(m+k))!}{(j-m)!} \right]^{1/2} (J_+)^k |j, m\rangle$$

を利用す。  $j \rightarrow l, m \rightarrow 0, k \rightarrow m$  とす。

$$|l, m\rangle = \hbar^{-m} \left[ \frac{l!}{(l+m)!} \frac{(l-m)!}{l!} \right]^{1/2} L_+^m |l, 0\rangle$$

$$Y_{l0} = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} P_l \quad \text{に } L_+ \text{ を } m \text{ 回作用させると}$$

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

の関係を利用し、 $m=0, k=m, f=P_l$  とす。

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

これを  $T=2$  式を用いて。

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

•  $Y_{lm}$  の決定 ( $m' = -m, m \geq 0$ )

$$|j, m-k\rangle = \hbar^{-k} \left[ \frac{(j+m-k)!}{(j+m)!} \frac{(j-m)!}{(j-(m-k))!} \right]^{1/2} (J_-)^k |j, m\rangle$$

$$\xrightarrow{j=l, m=0, k=m} |l, -m\rangle = \hbar^{-m} \left[ \frac{(l-m)!}{(l+m)!} \right]^{1/2} L_-^m |l, 0\rangle$$

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

$$\xrightarrow{m=0, k=m, f=P_l} L_-^m [P_l] = \hbar^m e^{-im\phi} \sin^m \theta \left[ \frac{d}{d \cos \theta} \right]^m P_l$$

上の2式を利用し.

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

○ 球面調和関数のまとめ.

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

→ 軌道角運動量は球面上の演算子.

球面調和関数は次のような性質を持つ.

$$\begin{aligned}
 L^2 Y_{lm} &= \hbar^2 l(l+1) Y_{lm} \\
 L_z Y_{lm} &= \hbar m Y_{lm} \quad (L_z = -i\hbar \partial_\phi) \\
 L_+ Y_{ll} &= L_- Y_{l,-l} = 0
 \end{aligned}$$

また、球面調和関数は次のように表せる. ( $m \geq 0, m' = -m$ )

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

$$Y_{lm}^* = (-1)^m Y_{lm'}$$

これをまとめると.

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

$$\text{ここで } P_l(t) = \frac{1}{2^l l!} \left( \frac{d}{dt} \right)^l (t^2-1)^l, \quad P_l^{|m|}(t) = (1-t^2)^{\frac{|m|}{2}} \left( \frac{d}{dt} \right)^l P_l(t)$$

◦ 全角運動量とルジャンドル関数の性質

$$L = -i\hbar \left( e_\phi \partial_\theta - e_\theta \frac{1}{\sin\theta} \partial_\phi \right)$$

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

$$e_\phi = \begin{pmatrix} -\sin\phi \\ \cos\phi \\ 0 \end{pmatrix} \quad \partial_\phi e_\phi = \begin{pmatrix} -\cos\phi \\ -\sin\phi \\ 0 \end{pmatrix}$$

また,  $\partial_\theta e_\phi = 0$ ,  $e_\theta \cdot \partial_\phi e_\theta = 0$ ,  $e_\phi \cdot \partial_\theta e_\theta = 0$

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

$$= -\hbar^2 \left[ \cancel{(e_\phi \cdot e_\phi) \partial_\theta^2 + (e_\phi \cdot \partial_\theta e_\phi) \partial_\theta - (e_\phi \cdot e_\theta) \partial_\theta \frac{1}{\sin\theta} \partial_\phi} \right.$$

$$\quad \left. - \cancel{(e_\phi \cdot \partial_\theta e_\theta) \frac{1}{\sin\theta} \partial_\phi - (e_\theta \cdot e_\phi) \frac{1}{\sin\theta} \partial_\phi \partial_\theta} \right.$$

$$\quad \left. - (e_\theta \cdot \partial_\phi e_\phi) \frac{1}{\sin\theta} \partial_\theta + (e_\theta \cdot e_\theta) \frac{1}{\sin^2\theta} \partial_\phi^2 + \cancel{(e_\theta \cdot \partial_\phi e_\theta) \frac{1}{\sin^2\theta} \partial_\phi} \right]$$

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

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

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

$$\partial_\theta (\sin\theta \partial_\theta) = \cos\theta \partial_\theta + \sin\theta \partial_\theta^2$$

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

$Y_{lm}$  の性質より、 $L^2 Y_{lm} = \hbar^2 l(l+1) Y_{lm}$

すなわち、 $Y_{lm} = (2\pi)^{-1/2} e^{im\phi} \Theta_{lm}(\theta)$  とおける。

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

$$\frac{d}{d\theta} = -\sin\theta \frac{d}{d\cos\theta} \text{ より、} \left[ -\frac{d}{d\cos\theta} (\sin^2\theta \frac{d}{d\cos\theta}) + \frac{m^2}{\sin^2\theta} \right] \Theta_{lm} = l(l+1) \Theta_{lm}$$

$$\text{ここで、} \Theta_{lm}(\theta) = \sqrt{\frac{2l+1}{2} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} P_l^m(\cos\theta) \text{ であり、} t = \cos\theta \text{ とし、}$$

$$\left[ -\frac{d}{dt} ((1-t^2) \frac{d}{dt}) + \frac{m^2}{(1-t^2)} \right] P_l^m(t) = l(l+1) P_l^m(t).$$

以上より、ルジャンドルの陪関数  $P_l^m$  は、次の微分方程式を満たす。

$$\underline{\frac{d}{dt} \left[ (1-t^2) \frac{d}{dt} P_l^m(t) \right] + \left[ l(l+1) - \frac{m^2}{1-t^2} \right] P_l^m(t) = 0}$$

これをルジャンドルの陪微分方程式と呼ぶ。特に  $m=0$  とし、

$$\frac{d}{dt} \left[ (1-t^2) \frac{d}{dt} P_l(t) \right] + l(l+1) P_l(t) = 0$$

球面調和関数  $Y_{lm}$  と  $Y_{l'm}$  の直交性から、

$$\underline{\frac{2l+1}{2} \frac{(l-m)!}{(l+m)!} \int_{-1}^1 d(\cos\theta) P_l^m(\cos\theta) P_{l'}^m(\cos\theta) = \delta_{ll'}}$$

$l$  と  $l'$  を区別していいから、一般論より  $l=l'$  のとき以外には  $\neq 0$  になる。

$$\text{特に } m=0 \text{ のとき、} \frac{2l+1}{2} \int_{-1}^1 d\cos\theta P_l^m(\cos\theta) P_{l'}^m(\cos\theta) = \delta_{ll'}$$

# 0ルジャンドール多項式の母関数展開と多重極展開

$$\begin{aligned} \text{多重極展開: } \frac{1}{|r-r'|} &= \frac{1}{\sqrt{r^2 + r'^2 - 2r \cdot r'}} \\ &= \frac{1}{r >} \frac{1}{\sqrt{1 - 2\left(\frac{r'}{r}\right) \cos\theta + \left(\frac{r'}{r}\right)^2}} \\ &= \sum_{l=0}^{\infty} \frac{r'^l}{r^{l+1}} P_l(\cos\theta) \end{aligned}$$

これを導く.

$$\text{ロドリゲスの公式: } P_l(t) = \frac{1}{2^l l!} \left(\frac{d}{dt}\right)^l (t^2-1)^l$$

ここで、ガウサの定理を導入.

$z$ - $\bar{z}$  の積分定理より、ある関数  $f(z)$  が複素平面上正則な領域内  $z$  を正の向きに囲む閉曲線  $C_z^+$  に対して、

$$f(z) = \frac{1}{2\pi i} \int_{C_z^+} d\xi \frac{f(\xi)}{\xi - z} \quad \text{これを } n \text{ 回微分して.}$$

$$\underline{f^{(n)}(z) = \frac{n!}{2\pi i} \int_{C_z^+} d\xi \frac{f(\xi)}{(\xi - z)^{n+1}} \quad \text{これがガウサの定理.}}$$

ロドリゲスの公式にガウサの定理を用いると

$$\begin{aligned} P_l(t) &= \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l}{dt^l} (t^2-1)^l \stackrel{\text{ガウサの定理}}{=} \frac{1}{2^l l!} \frac{l!}{2\pi i} \int_{C_t^+} d\xi \frac{(\xi^2-1)^l}{(\xi-t)^{l+1}} \\ &= \frac{1}{2\pi i} \int_{C_t^+} d\xi \left[ \frac{(\xi^2-1)^l}{2(\xi-t)} \right]^l \frac{1}{\xi-t} \end{aligned}$$



$$P_{\text{rel}}(t) = \frac{1}{2\pi i} \int_{C_t} d\zeta \left[ \frac{(\zeta^2 - 1)}{2(\zeta - t)} \right]^2 \frac{1}{\zeta - t}$$

ここで  $\frac{1}{\zeta} = \frac{(\zeta^2 - 1)}{2(\zeta - t)}$  と  $\zeta \rightarrow \zeta$  の変換を考える。

$$\zeta(\zeta^2 - 1) = 2(\zeta - t) \Leftrightarrow \zeta^3 - 2\zeta + 2t - \zeta = 0$$

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

ここで  $\zeta = (1 \pm R) / \zeta$ ,  $R = \sqrt{1 - 2t\zeta + \zeta^2}$  とおくと。

$\zeta \rightarrow 0$  の時,  $R \rightarrow 1 - t\zeta + \frac{1}{2}\zeta^2$ ,  $\zeta \rightarrow \frac{1 \pm (1 - t\zeta + \frac{1}{2}\zeta^2)}{\zeta}$

したがって,  $\zeta = \frac{1-R}{\zeta}$  の分枝をよければ。

$\zeta \rightarrow 0$  のとき,  $\zeta \rightarrow t - \frac{1}{2}\zeta$

また,  $\zeta = \frac{1+R}{\zeta}$  のとき,

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

$$= \frac{-R + R^2 + t\zeta - \zeta^2}{\zeta^2 R} d\zeta$$

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

$$\therefore \frac{d\zeta}{\zeta - t} = \frac{d\zeta}{\zeta R}$$

$$\frac{dz}{z-t} = \frac{dc}{sR} \quad P_\ell(t) = \frac{1}{2\pi i} \int_{C_0^+} dz \left[\frac{1}{z}\right]^\ell \frac{1}{z-t}$$

$$\text{よって } P_\ell(t) = \frac{1}{2\pi i} \int_{C_0^+} dz \frac{1}{R z^{\ell+1}}$$

$$= \frac{1}{\ell!} \frac{d^\ell}{dz^\ell} \frac{1}{R} \Big|_{z=0}$$

$$= \frac{1}{\ell!} \frac{d^\ell}{dz^\ell} \frac{1}{\sqrt{1-2tc+cz^2}} \Big|_{z=0}$$

これは、 $\frac{1}{R}$  を  $c=0$  の周りでテイラー展開したものを表すこと見れば、

$$\frac{1}{R} \text{の展開は } \frac{1}{R} = \frac{1}{\sqrt{1-2tc+cz^2}} = \sum_{\ell=0}^{\infty} P_\ell(t) c^\ell$$

これをルジャンドル多項式の母関数展開と呼ぶ。

これを利用して、

$$\begin{aligned} \frac{1}{|r-r'|} &= \frac{1}{\sqrt{r^2 + r'^2 - 2r \cdot r'}} \\ &= \frac{1}{r_>} \frac{1}{\sqrt{1 - 2\left(\frac{r_<}{r_>}\right) \cos\theta + \left(\frac{r_<}{r_>}\right)^2}} \\ &= \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{r_<^\ell}{r_>^{\ell+1}} P_\ell(\cos\theta) \quad c = \cos\theta, \quad c = \frac{r_<}{r_>} \end{aligned}$$

ここで、 $r$  と  $r'$  が異なる角の入ってきたとき、

$|r|$  と  $|r'|$  の大きい方を  $r_>$ 、小さい方を  $r_<$ 。