201810834

量子力学 第20回　相原大地

$j = l = 0, 1, 2, \dots$ の回転行列と球面調和関数

$$D^j_{m'm} = e^{-im'\alpha} d^j_{m'm} e^{-im\gamma}$$

$$d^j_{m'm} = \sum_k (-1)^{k-m+m'} \frac{\sqrt{(j+m)!(j-m)!(j+m')!(j-m')!}}{(j+m-k)!\,k!\,(k-m+m')!\,(j-k-m')!} \times \cos^{2j-2k+m-m'}\frac{\beta}{2}\,\sin^{2k-m+m'}\frac{\beta}{2}$$

$j = l$ をゼロ以上の整数としたとき, $m=0$, $m'=M$ と書いて,

$$D^l_{M0}(\alpha\beta\gamma) = e^{-iM\alpha}\sum_k (-1)^{k+M} \frac{\sqrt{l!\,l!\,(l+M)!\,(l-M)!}}{(l-k)!\,k!\,(k+M)!\,\underbrace{(l-k-M)!}_{(-k)!}} \times \cos^{2l-2k-M}\frac{\beta}{2}\,\sin^{2k+M}\frac{\beta}{2}$$

特に $M=l$ とすれば

$$D^l_{l0} = e^{-iM\alpha}\sum_{k=0}(-1)^{k+l}\frac{\sqrt{l!\,l!\,(2l)!\,0!}}{(l-k)!\,k!\,(k+l)!\,(l-k-l)!} \times \cos^{l-2k}\frac{\beta}{2}\,\sin^{2k+l}\frac{\beta}{2}$$

$$= e^{-il\alpha}(-1)^l \frac{\sqrt{l!\,l!\,(2l)!\,0!}}{l!\,0!\,l!\,0!}\underbrace{\cos^l\frac{\beta}{2}\,\sin^l\frac{\beta}{2}}_{=\left(\frac{1}{2}\sin\beta\right)^l}$$

$$= (-1)^l e^{-il\alpha}\frac{\sqrt{(2l)!}}{2^l\, l!}\sin^l\beta$$

球面調和関数 $Y_{ll} = (-1)^l\sqrt{\frac{(2l+1)!}{4\pi}}\frac{1}{2^l\, l!}e^{il\phi}\sin^l\theta$

と比べると,

$$Y_{ll}(\beta,\alpha) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}\left[D^l_{l0}(\alpha,\beta)\right]^*$$

一般にオイラー角 $(\alpha_0, \beta_0, \gamma_0)$ により指定される回転 $R(\alpha_0, \beta_0, \gamma_0)$ とオイラー角 (α, β, γ) により指定される回転 $R(\alpha, \beta, \gamma)$ を考え, 回転Qを以下のように定める。

$$Q^{-1}R(\alpha,\beta,\gamma) = R(\alpha_0,\beta_0,\gamma_0) \qquad R = QR_0$$

つまり, オイラー角 $(\alpha_0, \beta_0, \gamma_0)$ により指定される回転に引き続いて回転Qを行うことがオイラー角 (α, β, γ) で指定される回転となるような回転である。

このとき $\hat{z}$ を $R(\alpha,\beta,\gamma)$ で回転した点の関数 $\psi(R(\alpha,\beta,\gamma)\hat{z})$ として,

$$Q\psi(R(\alpha,\beta,\gamma)\hat{z}) = \psi(Q^{-1}R(\alpha,\beta,\gamma)\hat{z}) = \psi(R(\alpha_0,\beta_0,\gamma_0)\hat{z})$$

Qで $R\hat{z}$ になる点

となる。ここで N は任意として、

$$\psi_M(R(\alpha,\beta,\gamma)\hat{z}) = [D^{\ell}_{MN}(R(\alpha,\beta,\gamma))]^*$$

とすると、これは spin ℓ 表現 D^{ℓ} の基底となることが次のように示せる

$$Q\psi_M(R(\alpha,\beta,\gamma)\hat{z}) = \psi_M(R(\alpha_0,\beta_0,\gamma_0)\hat{z})$$
$$= [D^{\ell}_{MN}(R(\alpha_0,\beta_0,\gamma_0))]^*$$
$$= [D^{\ell}_{MN}(Q^{-1}R(\alpha,\beta,\gamma))]^*$$
$$= [D^{\ell}_{MK}(Q^{-1})]^*[D^{\ell}_{KN}(R(\alpha,\beta,\gamma))]^*$$

D: Unitary $\rightarrow$ $= [[D^{\ell}(Q)]^{\dagger}]^*_{MK}[D^{\ell}_{KN}(R(\alpha,\beta,\gamma))]^*$

転置 $\rightarrow$ $= [D^{\ell}_{KN}(R(\alpha,\beta,\gamma))]^* D^{\ell}_{KM}(Q)$

$$= \psi_K(R(\alpha,\beta,\gamma)\hat{z}) D^{\ell}_{KM}(Q)$$ ← D^{ℓ}の基底

よって $Y_{\ell\ell}$での考察から規格化定数も含めて、N=0として、

$$Y_{\ell m}(\beta,\alpha) = Y_{\ell m}(R(\alpha,\beta,0)\hat{z})$$ $Y_{\ell m}$は spin ℓ 表現の基底

$$= \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}}[D^{\ell}_{m0}(\alpha,\beta)]^*$$
$$= \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}}\sum_k(-1)^{k+m}\frac{\ell!\sqrt{(\ell+m)!(\ell-m)!}}{(\ell-k)!k!(k+m)!(\ell-k-m)!}$$
$$\times \cos^{2\ell-2k-m}\frac{\beta}{2}\sin^{2k+m}\frac{\beta}{2}e^{im\alpha}$$

特に $Y_{\ell 0}(\beta,\alpha) = \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}}P_{\ell}(\cos\beta)$ だから、

$$D^{\ell}_{00}(R(\alpha,\beta,\gamma)) = P_{\ell}(\cos\beta)$$

オイラー角 $(\phi_0,\theta_0,0)$, $(\phi_1,\theta_1,0)$ に対応する回転を R_0, R_1 とし、

$$R_0^{-1}R_1 = R_2 \qquad R_1 = R_0R_2$$

に対応するオイラー角を (Φ,Θ,Γ) とする。このとき、

$$D^{\ell}_{00}(R_0^{-1}R_1) = \sum_m D^{\ell}_{0m}(R_0^{-1})D^{\ell}_{m0}(R_1)$$
$$= \sum_m[D^{\ell}_{m0}(R_0)]^* D^{\ell}_{m0}(R_1)$$
$$= D^{\ell}_{00}(R_2)$$

$$\therefore \frac{4\pi}{2\ell+1}\sum_m Y_{\ell m}(\theta_0,\phi_0)Y^*_{\ell m}(\theta_1,\phi_1) = P_{\ell}(\cos\Theta)$$

No.

Date

$\hat{z}_0 = R_0\hat{z}$, $\hat{z}_1 = R_1\hat{z}$, $\hat{z}_2 = R_2\hat{z}$

として

$$R_1\hat{z} = R_0R_2\hat{z}$$
$$\hat{z}_0 = R_0\hat{z}$$
$$\hat{z}_1 = R_0\hat{z}_2$$

であるから、$\hat{z}_0$ と $\hat{z}_1$ のなす角は $\hat{z}$ と $\hat{z}_2$ のなす角に等しく、これは Θ である。ここで $\hat{z}_0$ と $\hat{z}_1$ はそれぞれ (θ_0,φ_0), (θ_1,φ_1) で指定されているので、Θ は方向 (θ_0,φ_0) と (θ_1,φ_1) のなす角で、これが球面調和関数の加法定理である。

局所電荷分布の静電potentialの多重極展開

まず

$$\frac{1}{|\vec{r}-\vec{r}'|} = \sum_{\ell=0}^{\infty}\frac{r_<^{\ell}}{r_>^{\ell+1}}P_\ell(\cos\Theta) = 4\pi\sum_{\ell m}\frac{1}{2\ell+1}\frac{r_<^{\ell}}{r_>^{\ell+1}}Y_{\ell m}(\hat{\Omega})Y_{\ell m}^*(\hat{\Omega}')$$

局所的な電荷分布 $\rho(\vec{r})$ が十分遠方に作る静電potentialを $\phi(\vec{r})$ とすると、$\rho(\vec{r})=0$, $|\vec{r}| > R_0$. これに上記の展開を使えば $r_<=r'$, $r_>=r$ととれて、

$$\phi(\vec{r}) = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\int d^3r'\frac{\rho(\vec{r}')}{|\vec{r}-\vec{r}'|}$$
$$= \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\int d^3r'\rho(\vec{r}')(r')^{\ell}\sum Y_{\ell m}^*(\hat{r}')\frac{4\pi}{2\ell+1}\frac{1}{r^{\ell+1}}Y_{\ell m}(\hat{r})$$
$$= \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\sum_{\ell m}\frac{4\pi}{2\ell+1}\frac{q_{\ell m}}{r^{\ell+1}}Y_{\ell m}(\hat{r})$$

$$q_{\ell m} \equiv \int_{|\vec{r}|<R_0} d^3r'(r')^{\ell}\rho(\vec{r}')Y_{\ell m}^*(\hat{r}') \quad \text{多極子}$$

球面調和関数の積の積分

$$D^{j_1}_{m_1'm_1}D^{j_2}_{m_2'm_2} = \langle jm'|j_1m_1',j_2m_2'\rangle\langle jm|j_1m_1,j_2m_2\rangle D^{j}_{m'm}$$

$j_1=\ell_1$, $j_2=\ell_2$, $j=\ell$, $m_1=m_2=0$ として

$$[D^{\ell_1}_{m_1'0}D^{\ell_2}_{m_2'0}]^* = \langle \ell m'|\ell_1m_1',\ell_2m_2'\rangle\langle \ell m|\ell_10,j_20\rangle[D^{\ell}_{m'm}]^*$$
$$= \langle \ell m'|\ell_1m_1',\ell_2m_2'\rangle\langle \ell 0|\ell_10,j_20\rangle[D^{\ell}_{m'0}]^*$$

これを球面調和関数で書いて

$$\frac{4\pi}{\sqrt{(2\ell_1+1)(2\ell_2+1)}}Y_{\ell_1m_1'}Y_{\ell_2m_2'} = \langle \ell m'|\ell_1m_1',\ell_2m_2'\rangle\langle \ell 0|\ell_10,j_20\rangle\frac{\sqrt{4\pi}}{\sqrt{2\ell+1}}Y_{\ell m'}$$

No.

Date

$$\because\ Y_{\ell_1 m_1} Y_{\ell_2 m_2} = \sqrt{\frac{(2\ell_1+1)(2\ell_2+1)}{4\pi(2\ell+1)}}\langle \ell m | \ell_1 m_1, \ell_2 m_2 \rangle \langle \ell 0 | \ell_1 0, j_2 0 \rangle Y_{\ell m}$$

よって球面調和関数の直交性より

$$\int d\Omega\, Y^*_{\ell m}(\Omega) Y_{\ell_1 m_1}(\Omega) Y_{\ell_2 m_2}(\Omega)$$

$$= \left[\sqrt{\frac{(2\ell_1+1)(2\ell_2+1)}{4\pi(2\ell+1)}}\langle \ell 0 | \ell_1 0, j_2 0 \rangle\right] \langle \ell m | \ell_1 m_1, \ell_2 m_2 \rangle$$