No. 第20回

Date 7.21

回転行列と球面調和関数　　201810877　林美吹

$j=\ell=0,1,2,\cdots$ の回転行列と球面調和関数

$j=\ell$ を0以上の整数としたとき、$m=0$, $m'=M$ と書くとする。

$$D^j_{m'm}=e^{-im'\alpha}d^j_{m'm}e^{-im\gamma} \quad \cos^{2j-2k+m-m'}\frac{\beta}{2}\sin^{2k-m+m'}\frac{\beta}{2}$$

$$d^j_{m'm}=\sum_k(-)^{k-m+m'}\frac{\sqrt{(j+m)!(j-m)!(j+m')!(j-m')!}}{(j+m-k)!k!(k-m+m')!(j-k-m')!}$$ より、

$$D^\ell_{M0}(\alpha\beta\gamma)=e^{-iM\alpha}\sum_k(-)^{k+M}\frac{\sqrt{\ell!\ell!(\ell+M)!(\ell-M)!}}{(\ell-k)!\underbrace{k!}_{k\geq0}(k+M)!\underbrace{(\ell-k-M)!}_{M=\ell\text{のとき}(-k)!}}\cos^{2\ell-2k-M}\frac{\beta}{2}\sin^{2k+M}\frac{\beta}{2}$$

$k=0$のみ ← ← $-k\geq0$

特に、$M=\ell$ とすれば、

$$D^\ell_{\ell0}=e^{-i\ell\alpha}\sum_{k=0}(-)^{k+\ell}\frac{\sqrt{\ell!\ell!(2\ell)!0!}}{(\ell-k)!k!(k+\ell)!(\ell-k)!}\cos^{\ell-2k}\frac{\beta}{2}\sin^{2k+\ell}\frac{\beta}{2}$$

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

$$=(-)^\ell e^{-i\ell\alpha}\frac{\sqrt{(2\ell)!}}{2^\ell\ell!}\sin^\ell\beta$$

これを球面調和関数 $Y_{\ell m}$ の定義と比べる。

$$Y_{\ell\ell}=(-)^\ell\sqrt{\frac{(2\ell+1)!}{4\pi}}\frac{1}{2^\ell\ell!}e^{i\ell\phi}\sin^\ell\theta$$ であったので、

$$Y_{\ell\ell}(\beta,\alpha)=\sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}}\left[D^\ell_{\ell0}(\alpha,\beta)\right]^*$$

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。

$$Q^{-1} R(\alpha, \beta, \gamma) = R(\alpha_0, \beta_0, \gamma_0) \quad ⓪$$

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 を行うと、オイラー角 (α, β, γ) により指定される回転となる。

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

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

となる。ここで、Nは任意として、$\psi_M(R(\alpha, \beta, \gamma)\hat{z}) \equiv [D^\ell_{MN}(R(\alpha, \beta, \gamma))]^*$ ② とすると、これは表現 D^ℓ の基底となる。以下、その証明を行う。

$$
\begin{aligned}
Q\psi_M(R(\alpha, \beta, \gamma)\hat{z}) &= \psi_M(R(\alpha_0, \beta_0, \gamma_0)\hat{z}) \quad (\text{①より}) \\
&= [D^\ell_{MN}(R(\alpha_0, \beta_0, \gamma_0))]^* \quad (\text{②より}) \\
&= [D^\ell_{MN}(Q^{-1}R(\alpha, \beta, \gamma))]^* \quad (\text{⓪より}) \\
&= [D^\ell_{MK}(Q^{-1})]^*[D^\ell_{KN}(R(\alpha, \beta, \gamma))]^* \quad (Q^{-1}R\text{を行列の積とする}) \\
&= [D^\ell(Q)^\dagger]^*_{MK}[D^\ell_{KN}(R(\alpha, \beta, \gamma))]^* \quad (D:\text{unitary}) \\
&= [D^\ell_{KN}(R(\alpha, \beta, \gamma))]^* D^\ell_{KM}(Q) \\
&= \psi_K(R(\alpha, \beta, \gamma)\hat{z})\, D^\ell_{KM}(Q) \quad \leftarrow D^\ell\text{の基底}
\end{aligned}
$$

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

$$\boxed{Y_{\ell m}(\beta, \alpha) = Y_{\ell m}(R(\alpha, \beta, 0)\hat{z}) = \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}}\,[D^\ell_{m0}(\alpha, \beta)]^*}$$

$$= \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}} \sum_k (-)^{k+m} \frac{\ell!\sqrt{(\ell+m)!(\ell-m)!}}{(\ell-k)!\,k!\,(k+m)!\,(\ell-k-m)!}$$

$$\times \cos^{2\ell-2k-m}\frac{\beta}{2} \sin^{2k+m}\frac{\beta}{2}\, e^{im\alpha}$$

特に $Y_{\ell 0}(\beta, \alpha) = \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}} P_\ell(\cos\beta)$ だから、$\boxed{D^\ell_{00}(R(\alpha, \beta, \gamma)) = P_\ell(\cos\beta)}$

No.

Date

球面調和関数の加法定理

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、

$$R_0^{-1} R_1 = R_2$$

に対応するオイラー角を (Φ, Θ, Γ) とする。このとき、

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

より、

$$\boxed{\frac{4\pi}{2l+1} \sum_m Y_{lm}(\theta_0, \phi_0) Y^*_{lm}(\theta_1, \phi_1) = P_l(\cos\Theta)}$$

: 球面調和関数の加法定理

$\hat{z}_0 = R_0 \hat{z}$, $\hat{z}_1 = R_1 \hat{z}$, $\hat{z}_2 = R_2 \hat{z}$ として、$R_1 \hat{z} = R_0 R_2 \hat{z}$ より、

$\hat{z}_0 = R_0 \hat{z}$, $\hat{z}_1 = R_0 \hat{z}_2$ 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、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) で指定されていることに注意すれば Θ は方向 (θ_0, ϕ_0) と (θ_1, ϕ_1) とのなす角である。

局所電荷分布の静電ポテンシャルの多重極展開

まず、

$$\frac{1}{|\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}'|} = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{r_<^l}{r_>^{l+1}} P_l(\cos\theta) = 4\pi \sum_{lm} \frac{1}{2l+1} \frac{r_<^l}{r_>^{l+1}} Y_{lm}(\hat{\Omega}) Y^*_{lm}(\hat{\Omega}')$$

局所的な電荷分布 $\rho(\boldsymbol{r})$ が十分遠方に作る静電ポテンシャルを $\phi(\boldsymbol{r})$ とすると、$\rho(\boldsymbol{r}) = 0$, $|\boldsymbol{r}| > {}^\exists R_0$ となる。これに上記の展開を使うと、$r_< = r'$, $r_> = r$ ととれて、

$$\phi(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \int d^3r' \frac{\rho(\boldsymbol{r}')}{|\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}'|}$$

$$= \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \int d^3r' \rho(\boldsymbol{r}') (r')^l \sum_{lm} Y^*_{lm}(\hat{\boldsymbol{r}}') \frac{4\pi}{2l+1} \frac{1}{r^{l+1}} Y_{lm}(\hat{\boldsymbol{r}})$$

$$= \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \sum_{lm} \frac{4\pi}{2l+1} \frac{q_{lm}}{r^{l+1}} Y_{lm}(\hat{\boldsymbol{r}})$$

$$q_{lm} = \int_{|\boldsymbol{r}'| < R_0} d^3r' (r')^l \rho(\boldsymbol{r}') Y^*_{lm}(\hat{\boldsymbol{r}}') \quad : \text{多極子}$$

No.

Date

球面調和関数の積の積分

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

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

$$[D^{\ell_1}_{m_1'0} D^{\ell_2}_{m_2'0}]^* = \langle \ell m' | \ell_1 m_1', \ell_2 m_2' \rangle \langle \ell m | \ell_1 0, j_2 0 \rangle [D^{\ell}_{m'm}]^*$$

$$= \langle \ell m' | \ell_1 m_1', \ell_2 m_2' \rangle \langle \ell 0 | \ell_1 0, j_2 0 \rangle [D^{\ell}_{m'0}]^*$$

これを球面調和関数で書いて、

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

′をとって整理すると、

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

よって、球面調和関数の直交性より、

$$\int d\Omega\, Y^*_{\ell m}(\Omega) Y_{\ell_1 m_1}(\Omega) Y_{\ell_2 m_2}(\Omega) = \left[\sqrt{\frac{(2\ell_1+1)(2\ell_2+1)}{4\pi(2\ell+1)}} \langle \ell 0 | \ell_1 0, j_2 0 \rangle \right] \langle \ell m | \ell_1 m_1, \ell_2 m_2 \rangle$$

CG係数