

量子力学で特殊関数を学ぶ (球面調和関数)

緒方秀教

電気通信大学 情報・ネットワーク工学専攻

February 12, 2022

はじめに

今回の目的

量子力学を使って特殊関数の勉強をしよう。

- 特殊関数：量子力学の学習で一番のネック。
球面調和関数，Laguerre 多項式，Bessel 関数，…
- 逆に，量子力学の知識を用いて特殊関数の勉強はできるかも？
- (今回) 球面調和関数 (Legendre 多項式/陪関数) ← 角運動量の量子力学。

数学と物理

- 微分積分学 ↔ Newton 力学
- ベクトル解析 ↔ 電磁気学
- 特殊関数 ↔ 量子力学？

- ① はじめに
- ② 角運動量演算子とその固有状態
- ③ 球面調和関数
- ④ 球面調和関数のグラフ
- ⑤ Legendre 多項式／陪関数の諸公式
- ⑥ まとめ
- ⑦ 補遺 1：Laplacian の極座標表示
- ⑧ 補遺 2：Legendre 多項式の母関数

「補遺 1・2」は動画では説明しません。
PC スライドを web に置きますので、概要欄に記した URL にアクセスして
ご覧ください。

- ① はじめに
- ② 角運動量演算子とその固有状態
- ③ 球面調和関数
- ④ 球面調和関数のグラフ
- ⑤ Legendre 多項式／陪関数の諸公式
- ⑥ まとめ
- ⑦ 補遺 1：Laplacian の極座標表示
- ⑧ 補遺 2：Legendre 多項式の母関数

角運動量演算子とその固有状態

今回の登場人物

球面調和関数 (Legendre 多項式 / 陪関数)

- 球面調和関数：角運動量演算子の固有関数。
- 角運動量演算子：球対称な問題に現れる。

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{\hat{l}^2}{\hbar^2 r^2} \right] \psi + V(r)\psi = E\psi,$$

$$\hat{l}^2 = \hat{l}_x^2 + \hat{l}_y^2 + \hat{l}_z^2 \quad \text{角運動量ベクトルの自乗.}$$

- 角運動量演算子の性質から、球面調和関数 (Legendre 多項式 / 陪関数) の定義・諸公式を導出する。

角運動量演算子とその固有状態

角運動量演算子

$$\begin{aligned}\hat{l}_x &:= y\hat{p}_z - z\hat{p}_y, & \hat{l}_y &:= z\hat{p}_x - x\hat{p}_z, & \hat{l}_z &:= x\hat{p}_y - y\hat{p}_x \\ \hat{l}^2 &:= \hat{l}_x^2 + \hat{l}_y^2 + \hat{l}_z^2.\end{aligned}$$

交換関係

$$\begin{aligned}[\hat{l}_x, \hat{l}_y] &= i\hbar\hat{l}_z, & [\hat{l}_y, \hat{l}_z] &= i\hbar\hat{l}_x, & [\hat{l}_z, \hat{l}_x] &= i\hbar\hat{l}_y, \\ [\hat{l}^2, \hat{l}_z] &= 0 & \rightarrow & \hat{l}^2, \hat{l}_z \text{ は同時対角化可能,}\end{aligned}$$

i.e., \hat{l}^2, \hat{l}_z 双方の固有状態が存在する.

角運動量演算子とその固有状態

角運動量演算子

$$\begin{aligned}\hat{l}_x &:= y\hat{p}_z - z\hat{p}_y, & \hat{l}_y &:= z\hat{p}_x - x\hat{p}_z, & \hat{l}_z &:= x\hat{p}_y - y\hat{p}_x \\ \hat{l}^2 &:= \hat{l}_x^2 + \hat{l}_y^2 + \hat{l}_z^2.\end{aligned}$$

交換関係

$$\begin{aligned}[\hat{l}_x, \hat{l}_y] &= i\hbar\hat{l}_z, & [\hat{l}_y, \hat{l}_z] &= i\hbar\hat{l}_x, & [\hat{l}_z, \hat{l}_x] &= i\hbar\hat{l}_y, \\ [\hat{l}^2, \hat{l}_z] &= 0 \quad \rightarrow \quad \hat{l}^2, \hat{l}_z \text{ は同時対角化可能,}\end{aligned}$$

i.e., \hat{l}^2, \hat{l}_z 双方の固有状態が存在する.

角運動量演算子の代数的関係式から、角運動量演算子の固有値、固有状態に関する情報がかなり得られる。

角運動量演算子とその固有状態

角運動量演算子

$$\begin{aligned}\hat{l}_x &:= y\hat{p}_z - z\hat{p}_y, & \hat{l}_y &:= z\hat{p}_x - x\hat{p}_z, & \hat{l}_z &:= x\hat{p}_y - y\hat{p}_x \\ \hat{l}^2 &:= \hat{l}_x^2 + \hat{l}_y^2 + \hat{l}_z^2.\end{aligned}$$

交換関係

$$\begin{aligned}[\hat{l}_x, \hat{l}_y] &= i\hbar\hat{l}_z, & [\hat{l}_y, \hat{l}_z] &= i\hbar\hat{l}_x, & [\hat{l}_z, \hat{l}_x] &= i\hbar\hat{l}_y, \\ [\hat{l}^2, \hat{l}_z] &= 0 & \rightarrow & \hat{l}^2, \hat{l}_z \text{ は同時対角化可能,}\end{aligned}$$

i.e., \hat{l}^2, \hat{l}_z 双方の固有状態が存在する.

角運動量演算子の代数的性質のみから, \hat{l}^2, \hat{l}_z は次の固有値, 固有状態 $|l, m\rangle$ を持つことを示す.

$$\begin{aligned}\hat{l}^2|l, m\rangle &= \hbar^2 l(l+1)|l, m\rangle, & \hat{l}_z|l, m\rangle &= \hbar m|l, m\rangle, \\ l &= 0, 1, 2, \dots, & m &= 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l.\end{aligned}$$

$|l, m\rangle$ に対応する波動関数 ... 球面調和関数.

角運動量演算子とその固有状態

\hat{l}^2, \hat{l}_z の同時固有状態を $|a, m\rangle$ と書くことにする.

$$\begin{aligned}\hat{l}^2|a, m\rangle &= \hbar^2 a^2 |a, m\rangle, & \hat{l}_z|a, m\rangle &= \hbar m |a, m\rangle, \\ \hbar^2 a^2 &: \hat{l}^2 \text{ の固有値}, & \hbar m &: \hat{l}_z \text{ の固有値}.\end{aligned}$$

角運動量演算子とその固有状態

\hat{l}^2, \hat{l}_z の同時固有状態を $|a, m\rangle$ と書くことにする.

$$\hat{l}^2|a, m\rangle = \hbar^2 a^2 |a, m\rangle, \quad \hat{l}_z|a, m\rangle = \hbar m |a, m\rangle,$$

$\hbar^2 a^2$: \hat{l}^2 の固有値, $\hbar m$: \hat{l}_z の固有値.

- \hat{l}^2 の固有値 $\hbar^2 a^2$ を与えると, \hat{l}_z の固有値 $\hbar m$ に
上限 $\hbar m_{\max}$, 下限 $\hbar m_{\min}$ が存在する.

そして, \hat{l}_z の固有値 $\hbar m$ について次が成り立つ.

$$-\hbar a \leq \hbar m_{\min} \leq \hbar m \leq \hbar m_{\max} \leq \hbar a.$$

角運動量演算子とその固有状態

\hat{l}^2, \hat{l}_z の同時固有状態を $|a, m\rangle$ と書くことにする.

$$\begin{aligned}\hat{l}^2|a, m\rangle &= \hbar^2 a^2 |a, m\rangle, & \hat{l}_z|a, m\rangle &= \hbar m |a, m\rangle, \\ \hbar^2 a^2 &: \hat{l}^2 \text{ の固有値}, & \hbar m &: \hat{l}_z \text{ の固有値}.\end{aligned}$$

- \hat{l}^2 の固有値 $\hbar^2 a^2$ を与えると, \hat{l}_z の固有値 $\hbar m$ に
上限 $\hbar m_{\max}$, 下限 $\hbar m_{\min}$ が存在する.

そして, \hat{l}_z の固有値 $\hbar m$ について次が成り立つ.

$$-\hbar a \leq \hbar m_{\min} \leq \hbar m \leq \hbar m_{\max} \leq \hbar a.$$

$\therefore \hat{l}^2 - \hat{l}_z^2 = \hat{l}_x^2 + \hat{l}_y^2$ を用いて,

$$\hbar^2(a^2 - m^2) = \langle a, m | (\hat{l}^2 - \hat{l}_z^2) | a, m \rangle = \langle a, m | (\hat{l}_x^2 + \hat{l}_y^2) | a, m \rangle \geq 0,$$

$$\therefore -a \leq m \leq a.$$



昇降演算子

$$\hat{l}_{\pm} := \hat{l}_x \pm i\hat{l}_y.$$

昇降演算子 \hat{l}_{\pm} は \hat{l}_z の固有値を $\pm\hbar$ だけ変えた \hat{l}_z の固有状態を作る.

$$\hat{l}_z \hat{l}_{\pm} |a, m\rangle = \hbar(m \pm 1) \hat{l}_{\pm} |a, m\rangle.$$

角運動量演算子とその固有状態

昇降演算子

$$\hat{l}_{\pm} := \hat{l}_x \pm i\hat{l}_y.$$

昇降演算子 \hat{l}_{\pm} は \hat{l}_z の固有値を $\pm\hbar$ だけ変えた \hat{l}_z の固有状態を作る.

$$\hat{l}_z \hat{l}_{\pm} |a, m\rangle = \hbar(m \pm 1) \hat{l}_{\pm} |a, m\rangle.$$

\therefore 次の交換関係が成り立つことが示される.

$$[\hat{l}_z, \hat{l}_{\pm}] = \pm\hbar \hat{l}_{\pm}.$$

これを用いて,

$$\hat{l}_z \hat{l}_{\pm} |a, m\rangle = (\hat{l}_{\pm} \hat{l}_z + [\hat{l}_z, \hat{l}_{\pm}]) |a, m\rangle = \hbar(m \pm 1) \hat{l}_{\pm} |a, m\rangle$$

□

角運動量演算子とその固有状態

昇降演算子

$$\hat{l}_{\pm} := \hat{l}_x \pm i\hat{l}_y.$$

昇降演算子 \hat{l}_{\pm} は \hat{l}_z の固有値を $\pm\hbar$ だけ変えた \hat{l}_z の固有状態を作る。

$$\hat{l}_z \hat{l}_{\pm} |a, m\rangle = \hbar(m \pm 1) \hat{l}_{\pm} |a, m\rangle.$$

\therefore 次の交換関係が成り立つことが示される。

$$[\hat{l}_z, \hat{l}_{\pm}] = \pm\hbar \hat{l}_{\pm}.$$

これを用いて,

$$\hat{l}_z \hat{l}_{\pm} |a, m\rangle = (\hat{l}_{\pm} \hat{l}_z + [\hat{l}_z, \hat{l}_{\pm}]) |a, m\rangle = \hbar(m \pm 1) \hat{l}_{\pm} |a, m\rangle$$

□

演算子 \hat{l}_z の固有値 (\hbar ずつ変わる)。

$$-\hbar a \leq \hbar m_{\min}, \hbar(m_{\min} + 1), \hbar(m_{\min} + 2), \dots, \hbar(m_{\max} - 1), \hbar m_{\max} \leq \hbar a,$$

角運動量演算子とその固有状態

\hat{l}^2 の固有値 $\hbar^2 a^2$ を m_{\max} を用いて表す.

角運動量演算子とその固有状態

\hat{l}^2 の固有値 $\hbar^2 a^2$ を m_{\max} を用いて表す.

次の2つを用いる.

$$\hat{l}^2 = \hat{l}_- \hat{l}_+ + \hat{l}_z^2 + \hbar \hat{l}_z.$$

$$\hat{l}_+ |a, m_{\max}\rangle = 0 \quad (\hbar m_{\max} \text{ より大きい } \hat{l}_z \text{ の固有値は存在しない}).$$

$$\begin{aligned} 0 &= \langle a, m_{\max} | \hat{l}_- \hat{l}_+ |a, m_{\max}\rangle = \langle a, m_{\max} | (\hat{l}^2 - \hat{l}_z^2 - \hbar \hat{l}_z) |a, m_{\max}\rangle \\ &= \hbar^2 (a^2 - m_{\max}^2 - m_{\max}), \end{aligned}$$

角運動量演算子とその固有状態

\hat{l}^2 の固有値 $\hbar^2 a^2$ を m_{\max} を用いて表す.

次の2つを用いる.

$$\hat{l}^2 = \hat{l}_- \hat{l}_+ + \hat{l}_z^2 + \hbar \hat{l}_z.$$

$$\hat{l}_+ |a, m_{\max}\rangle = 0 \quad (\hbar m_{\max} \text{ より大きい } \hat{l}_z \text{ の固有値は存在しない}).$$

$$\begin{aligned} 0 &= \langle a, m_{\max} | \hat{l}_- \hat{l}_+ |a, m_{\max}\rangle = \langle a, m_{\max} | (\hat{l}^2 - \hat{l}_z^2 - \hbar \hat{l}_z) |a, m_{\max}\rangle \\ &= \hbar^2 (a^2 - m_{\max}^2 - m_{\max}), \end{aligned}$$

$$\therefore \hat{l}^2 \text{ の固有値 } \hbar^2 a^2 = \hbar^2 m_{\max} (m_{\max} + 1).$$

$l = m_{\max}$ と書く. よって, \hat{l}^2 の固有値は $\hbar^2 l(l+1)$ である.

そして, $|a, m\rangle$ を以後 $|l, m\rangle$ と書くことにする.

$$\begin{aligned} \hat{l}^2 |l, m\rangle &= \hbar^2 l(l+1) |l, m\rangle, \quad \hat{l}_z |l, m\rangle = \hbar m |l, m\rangle, \\ m &= m_{\min}, \dots, l-2, l-1, l. \end{aligned}$$

角運動量演算子とその固有状態

昇降演算子 \hat{l}_{\pm} は \hat{l}_z の固有値を $\pm\hbar$ だけ変えた固有状態をつくる演算子であった。ここで、 \hat{l}_{\pm} は具体的に次のように作用することを示す。

$$\begin{aligned}\hat{l}_+|l, m\rangle &= \hbar\sqrt{(l-m)(l+m+1)}|l, m+1\rangle, \\ \hat{l}_-|l, m\rangle &= \hbar\sqrt{(l+m)(l-m+1)}|l, m-1\rangle.\end{aligned}$$

角運動量演算子とその固有状態

昇降演算子 \hat{l}_{\pm} は \hat{l}_z の固有値を $\pm\hbar$ だけ変えた固有状態をつくる演算子であった。ここで、 \hat{l}_{\pm} は具体的に次のように作用することを示す。

$$\begin{aligned}\hat{l}_+|l, m\rangle &= \hbar\sqrt{(l-m)(l+m+1)}|l, m+1\rangle, \\ \hat{l}_-|l, m\rangle &= \hbar\sqrt{(l+m)(l-m+1)}|l, m-1\rangle.\end{aligned}$$

\therefore 次の演算子の等式を用いる。

$$\hat{l}_+\hat{l}_- = \hat{l}^2 + \hat{l}_z^2 - \hbar\hat{l}_z, \quad \hat{l}_-\hat{l}_+ = \hat{l}^2 + \hat{l}_z^2 + \hbar\hat{l}_z.$$

$\hat{l}_-|l, m\rangle = c_-|l, m-1\rangle$ とおく。

$$\begin{aligned}|c_-|^2 &= \|\hat{l}_-|l, m\rangle\|^2 = \langle l, m|\hat{l}_+\hat{l}_-|l, m\rangle = \langle l, m|(\hat{l}^2 - \hat{l}_z^2 + \hbar\hat{l}_z)|l, m\rangle \\ &= \hbar^2[l(l+1) - m^2 + m],\end{aligned}$$

$$\therefore c_- = (e^{ic} \times) \hbar\sqrt{(l+m)(l-m+1)}.$$

$\hat{l}_+|l, m\rangle = c_+|l, m+1\rangle$ とおく。

$$\begin{aligned}|c_+|^2 &= \|\hat{l}_+|l, m\rangle\|^2 = \langle l, m|\hat{l}_-\hat{l}_+|l, m\rangle = \langle l, m|(\hat{l}^2 - \hat{l}_z^2 - \hbar\hat{l}_z)|l, m\rangle \\ &= \hbar^2[l(l+1) - m^2 - m],\end{aligned}$$

$$\therefore c_+ = (e^{ic} \times) \hbar\sqrt{(l-m)(l+m+1)}.$$

角運動量演算子とその固有状態

$$\hat{l}_- |l, m\rangle = \hbar \sqrt{(l+m)(l-m+1)} |l, m-1\rangle.$$

\hat{l}_z の最小固有値 $\hbar m_{\min}$ の固有状態 $|l, m_{\min}\rangle$ に対しては

$\hat{l}_- |l, m_{\min}\rangle = 0$ となるから,

$$0 = \hat{l}_- |l, m_{\min}\rangle = \hbar \sqrt{(l+m_{\min})(l-m_{\min}+1)} |l, m_{\min}\rangle,$$

$$(l+m_{\min}) \underbrace{(l-m_{\min}+1)}_{m_{\max}-m_{\min}+1 \geq 1} = 0.$$

$$\therefore m_{\min} = -l.$$

角運動量演算子とその固有状態

$$\hat{l}_- |l, m\rangle = \hbar \sqrt{(l+m)(l-m+1)} |l, m-1\rangle.$$

\hat{l}_z の最小固有値 $\hbar m_{\min}$ の固有状態 $|l, m_{\min}\rangle$ に対しては

$\hat{l}_- |l, m_{\min}\rangle = 0$ となるから,

$$0 = \hat{l}_- |l, m_{\min}\rangle = \hbar \sqrt{(l+m_{\min})(l-m_{\min}+1)} |l, m_{\min}\rangle,$$

$$(l+m_{\min}) \underbrace{(l-m_{\min}+1)}_{m_{\max}-m_{\min}+1 \geq 1} = 0.$$

$$m_{\max} - m_{\min} + 1 \geq 1$$

$$\therefore m_{\min} = -l.$$

- \hat{l}^2 の固有値: $\hbar^2 l(l+1)$.
- \hat{l}_z の固有値: $\hbar m$, $m = -l, -l+1, -l+2, \dots, l$.

$$2l = l - (-l) = m_{\max} - m_{\min} = \text{非負整数}, \quad \therefore l = \frac{1}{2} \times \text{非負整数}.$$

角運動量演算子とその固有状態

演算子 \hat{l}_z の微分演算子表記を用いると、 $l =$ 非負整数 を得る。
極座標 (r, θ, ϕ) を用いると、

$$\hat{l}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi}.$$

\hat{l}_z の固有関数 : $\text{const.} \times e^{im\phi}$ (固有値 $\hbar m$).

固有関数の一価性 (ϕ について周期 2π の周期関数である) より、
 m は整数である。よって、 $l = m_{\max} = -m_{\min}$ も非負整数である。

$$m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l \quad (l = 0, 1, 2, \dots).$$

(まとめ) 角運動量演算子の固有状態 $|l, m\rangle$

\hat{l}^2, \hat{l}_z の固有値.

$$\hat{l}^2|l, m\rangle = \hbar^2 l(l+1)|l, m\rangle, \quad \hat{l}_z|l, m\rangle = \hbar m|l, m\rangle,$$
$$l = 0, 1, 2, \dots, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l,$$

昇降演算子.

$$\hat{l}_{\pm} := \hat{l}_x \pm i\hat{l}_y,$$
$$\hat{l}_+|l, m\rangle = \hbar\sqrt{(l-m)(l+m+1)}|l, m+1\rangle,$$
$$\hat{l}_-|l, m\rangle = \hbar\sqrt{(l+m)(l-m+1)}|l, m-1\rangle.$$

- 1 はじめに
- 2 角運動量演算子とその固有状態
- 3 球面調和関数**
- 4 球面調和関数のグラフ
- 5 Legendre 多項式／陪関数の諸公式
- 6 まとめ
- 7 補遺 1：Laplacian の極座標表示
- 8 補遺 2：Legendre 多項式の母関数

球面調和関数

これから角運動量演算子を具体的に微分演算子で表して、角運動量演算子の固有関数（球面調和関数）の具体形を求める。

球座標 (r, θ, ϕ) による角運動量演算子の表示。

$$\hat{l}^2 = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right], \quad \hat{l}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi}$$
$$\hat{l}_{\pm} = \hbar e^{\pm i\phi} \left(\pm \frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right).$$

\hat{l}^2, \hat{l}_z の同時固有状態 $|l, m\rangle$ の波動関数を $Y_{lm}(\theta, \phi)$ と表す。

$$\hat{l}^2 Y_{lm}(\theta, \phi) = \hbar^2 l(l+1) Y_{lm}(\theta, \phi), \quad \hat{l}_z Y_{lm}(\theta, \phi) = \hbar m Y_{lm}(\theta, \phi).$$

球面調和関数

球対称な問題の Schrödinger 方程式 (球座標表示)

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{\hat{l}^2}{\hbar^2 r^2} \right] \psi + V(r)\psi = E\psi,$$
$$\hat{l}^2 = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right].$$

Laplacian Δ の極座標表示は「補遺 1」で導出します。

概要欄の URL にアクセスしてご覧ください。

変数分離の方法により Schrödinger 方程式の解は次の形で得られる。

$$\psi(r, \theta, \phi) = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l C_{nlm} R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \phi)$$

(C_{nlm} : const.).

球面調和関数

- $\hat{l}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi}$ より $Y_{lm}(\theta, \phi) \propto e^{im\phi}$ であるから,

$$Y_{lm}(\theta, \phi) = \Theta_{lm}(\theta)e^{im\phi} \quad \text{と書ける.}$$

球面調和関数

- $\hat{l}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi}$ より $Y_{lm}(\theta, \phi) \propto e^{im\phi}$ であるから,

$$Y_{lm}(\theta, \phi) = \Theta_{lm}(\theta)e^{im\phi} \quad \text{と書ける.}$$

- $Y_{lm}(\theta, \phi)$ を求めるための種 $Y_u(\theta, \phi)$ を $\hat{l}_+ Y_u = 0$ ($\hat{l}_+ |l, l\rangle = 0$) から求める.

$$\begin{aligned}\hat{l}_+ Y_u(\theta, \phi) &= \hbar e^{i\phi} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \Theta_u(\theta) e^{i\phi} \\ &= \hbar e^{i(l+1)\phi} \left(\frac{d}{d\theta} - l \cot \theta \right) \Theta_u(\theta) = 0,\end{aligned}$$

$$\left(\frac{d}{d\theta} - l \cot \theta \right) \Theta_u(\theta) = \sin^l \theta \frac{d}{d\theta} \left(\frac{\Theta_u(\theta)}{\sin^l \theta} \right) = 0,$$

$$\therefore \Theta_u(\theta) = C_l \sin^l \theta, \quad \text{i.e.,} \quad Y_u(\theta, \phi) = C_l \sin^l \theta e^{il\phi}.$$

規格化条件

$$\langle l, l | l, l \rangle = \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi d\theta \sin \theta |Y_u(\theta, \phi)|^2 = 1$$

より係数 C_l を求めると,

$$C_l = e^{i\alpha} \sqrt{\frac{(2l+1)!!}{4\pi(2l)!!}} \quad (\alpha : \text{実定数}).$$

球面調和関数

Y_{ll} に \hat{l}_- を順次作用させて $Y_{ll-1} \rightarrow Y_{ll-2} \rightarrow \dots \rightarrow Y_{l0}$ を求める.

- $\hat{l}_- Y_{ll} = \hbar\sqrt{2l}Y_{ll-1}$ より $Y_{ll-1}(\theta, \phi)$ を求める.

$$\begin{aligned} Y_{l,l-1}(\theta, \phi) &= \Theta_{l,l-1}(\theta)e^{i(l-1)\phi} = \frac{1}{\hbar\sqrt{2l}}\hat{l}_- Y_{l,l}(\theta, \phi) \\ &= \frac{1}{\hbar\sqrt{2l}} \cdot \hbar e^{-i\phi} \underbrace{\left(-\frac{\partial}{\partial\theta} + i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\phi}\right)}_{(1)} [\Theta_{l,l}(\theta)e^{il\phi}], \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} (1) &= -e^{i(l-1)\phi} \left(\frac{d}{d\theta} + l\cot\theta\right) \Theta_{l,l}(\theta) \\ &= -C_l e^{i(l-1)\phi} \frac{1}{\sin^l\theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin^l\theta \cdot \sin^l\theta\right) = C_l \frac{e^{i(l-1)\phi}}{\sin^{l-1}\theta} \frac{d(\sin^{2l}\theta)}{d(\cos\theta)}, \end{aligned}$$

$$\therefore Y_{l,l-1}(\theta, \phi) = \Theta_{l,l-1}(\theta)e^{i(l-1)\phi} = \frac{C_l}{\sqrt{2l}} \frac{1}{\sin^{l-1}\theta} \frac{d(\sin^{2l}\theta)}{d(\cos\theta)} e^{i(l-1)\phi}.$$

球面調和関数

- $\hat{l}_- Y_{l,l-1} = \hbar\sqrt{2(2l-1)}Y_{l,l-2}$ より $Y_{l,l-2}(\theta, \phi)$ を求める。

$$\begin{aligned} Y_{l,l-2}(\theta, \phi) &= \Theta_{l,l-2}(\theta)e^{i(l-2)\phi} = \frac{1}{\hbar\sqrt{2(2l-1)}}\hat{l}_- Y_{l,l-1}(\theta, \phi) \\ &= \frac{1}{\hbar\sqrt{2(2l-1)}} \cdot \underbrace{\hbar e^{-i\phi} \left(-\frac{\partial}{\partial\theta} + i \cot\theta \frac{\partial}{\partial\phi} \right)}_{(2)} \left[\Theta_{l,l-1}(\theta)e^{i(l-1)\phi} \right] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} (2) &= -e^{i(l-2)\phi} \left(\frac{d}{d\theta} + (l-1) \cot\theta \right) \Theta_{l,l-1}(\theta) \\ &= -\frac{C_l}{\sqrt{2l}} e^{i(l-2)\phi} \frac{1}{\sin^{l-1}\theta} \frac{d}{d\theta} \left[\sin^{l-1}\theta \cdot \frac{1}{\sin^{l-1}\theta} \frac{d(\sin^{2l}\theta)}{d(\cos\theta)} \right] \\ &= \frac{C_l}{\sqrt{2l}} e^{i(l-2)\phi} \frac{1}{\sin^{l-2}\theta} \frac{d^2(\sin^{2l}\theta)}{d(\cos\theta)^2}, \end{aligned}$$

$$\therefore Y_{l,l-2}(\theta, \phi) = \Theta_{l,l-2}(\theta)e^{i(l-2)\phi} = \frac{C_l}{\sqrt{2(2l)(2l-1)}} \frac{1}{\sin^{l-2}\theta} \frac{d^2(\sin^{2l}\theta)}{d(\cos\theta)^2} e^{i(l-2)\phi}.$$

球面調和関数

- $\hat{l}_- Y_{l,l-2} = \hbar\sqrt{3(2l-2)}Y_{l,l-3}$ より $Y_{l,l-3}(\theta, \phi)$ を求める.

$$\begin{aligned}
 Y_{l,l-3}(\theta, \phi) &= \Theta_{l,l-3}(\theta)e^{i(l-3)\phi} = \frac{1}{\hbar\sqrt{3(2l-2)}}\hat{l}_- Y_{l,l-2}(\theta, \phi) \\
 &= \frac{1}{\hbar\sqrt{3(2l-2)}} \cdot \underbrace{\hbar e^{-i\phi} \left(-\frac{\partial}{\partial\theta} + i \cot\theta \frac{\partial}{\partial\phi} \right)}_{(3)} \left[\Theta_{l,l-2}(\theta)e^{i(l-2)\phi} \right],
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 (3) &= -e^{i(l-3)\phi} \left(\frac{d}{d\theta} + (l-2)\cot\theta \right) \Theta_{l,l-2}(\theta) \\
 &= -\frac{C_l}{\sqrt{2(2l)(2l-1)}} e^{i(l-3)\phi} \frac{1}{\sin^{l-2}\theta} \frac{d}{d\theta} \left[\sin^{l-2}\theta \cdot \frac{1}{\sin^{l-2}\theta} \frac{d^2(\sin^{2l}\theta)}{d(\cos\theta)^2} \right] \\
 &= \frac{C_l}{\sqrt{2(2l)(2l-1)}} e^{i(l-3)\phi} \frac{1}{\sin^{l-3}\theta} \frac{d^3(\sin^{2l}\theta)}{d(\cos\theta)^3}, \\
 \therefore Y_{l,l-3}(\theta, \phi) &= \frac{C_l}{\sqrt{3!(2l)(2l-1)(2l-2)}} \frac{e^{i(l-3)\phi}}{\sin^{l-3}\theta} \frac{d^3(\sin^{2l}\theta)}{d(\cos\theta)^3}.
 \end{aligned}$$

- 以下同文．結局，次に到達する．

$$Y_{l0}(\theta, \phi) = \Theta_{l0}(\theta) = \frac{C_l}{\sqrt{(2l)!}} \frac{d^l(\sin^{2l} \theta)}{d(\cos \theta)^l} = \frac{e^{i\alpha}}{2^l l!} \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} \frac{d^l(\sin^{2l} \theta)}{d(\cos \theta)^l}.$$

$e^{i\alpha} = (-1)^l$ と選んで，次を得る．

球面調和関数

- 以下同文. 結局, 次に到達する.

$$Y_{l0}(\theta, \phi) = \Theta_{l0}(\theta) = \frac{C_l}{\sqrt{(2l)!}} \frac{d^l(\sin^{2l} \theta)}{d(\cos \theta)^l} = \frac{e^{i\alpha}}{2^l l!} \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} \frac{d^l(\sin^{2l} \theta)}{d(\cos \theta)^l}.$$

$e^{i\alpha} = (-1)^l$ と選んで, 次を得る.

$$Y_{l0}(\theta, \phi) = \Theta_{l0}(\theta) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} P_l(\cos \theta).$$

Legendre 多項式

$$P_l(x) = \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l}{dx^l} (x^2 - 1)^l \quad \text{i.e.,} \quad P_l(\cos \theta) = \frac{(-1)^l}{2^l l!} \frac{d^l(\sin^{2l} \theta)}{d(\cos \theta)^l} \\ (l = 0, 1, 2, \dots).$$

球面調和関数

$Y_{l0}(\theta, \phi)$ に上昇演算子 \hat{l}_+ を順次作用させて、球面調和関数 $Y_{lm}(\theta, \phi)$ を得る。

- $\hat{l}_+ Y_{l0} = \hbar\sqrt{l(l+1)}Y_{l1}$ より $Y_{l1}(\theta, \phi)$ を求める。

$$\begin{aligned} Y_{l,1}(\theta, \phi) &= \frac{1}{\hbar\sqrt{l(l+1)}}\hat{l}_+ Y_{l0}(\theta, \phi) \\ &= \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi l(l+1)}}e^{i\phi} \left(\frac{\partial}{\partial\theta} + i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\phi} \right) P_l(\cos\theta) \\ &= \sqrt{\frac{(2l+1)(l-1)!}{4\pi(l+1)!}}e^{i\phi} \frac{d}{d\theta} P_l(\cos\theta). \\ \therefore Y_{l,1}(\theta, \phi) &= -\sqrt{\frac{(2l+1)(l-1)!}{4\pi(l+1)!}}e^{i\phi} \sin\theta \frac{dP_l(\cos\theta)}{d(\cos\theta)}. \end{aligned}$$

球面調和関数

- $\hat{l}_+ Y_{11} = \hbar \sqrt{(l-1)(l+2)} Y_{12}$ より $Y_{12}(\theta, \phi)$ を求める.

$$\begin{aligned} Y_{12}(\theta, \phi) &= \frac{1}{\hbar \sqrt{(l-1)(l+2)}} \hat{l}_+ Y_{11}(\theta, \phi) \\ &= - \sqrt{\frac{(2l+1)(l-1)!}{4\pi(l+1)!(l+2)(l-1)}} \underbrace{e^{i\phi} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \left[e^{i\phi} \sin \theta \frac{dP_l(\cos \theta)}{d(\cos \theta)} \right]}_{(1)}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} (1) &= - e^{2i\phi} \left(\frac{d}{d\theta} - \cot \theta \right) \left[\sin \theta \frac{dP_l(\cos \theta)}{d(\cos \theta)} \right] \\ &= - e^{2i\phi} \sin \theta \frac{d}{d\theta} \left[\frac{1}{\sin \theta} \sin \theta \frac{dP_l(\cos \theta)}{d(\cos \theta)} \right] = e^{2i\phi} \sin^2 \theta \frac{d^2 P_l(\cos \theta)}{d(\cos \theta)^2}, \end{aligned}$$

$$\therefore Y_{12}(\theta, \phi) = e^{2i\phi} \sqrt{\frac{(2l+1)(l-2)!}{4\pi(l+2)!}} \sin^2 \theta \frac{d^2 P_l(\cos \theta)}{d(\cos \theta)^2}.$$

球面調和関数

- $\hat{l}_+ Y_{l2} = \hbar \sqrt{(l-2)(l+3)} Y_{l3}$ より $Y_{l3}(\theta, \phi)$ を求める.

$$\begin{aligned} Y_{l3}(\theta, \phi) &= \frac{1}{\hbar \sqrt{(l-2)(l+3)}} \hat{l}_+ Y_{l2}(\theta, \phi) \\ &= \sqrt{\frac{(2l+1)(l-2)!}{4\pi(l+2)!(l+3)(l-2)}} \underbrace{e^{i\phi} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \left[e^{2i\phi} \sin^2 \theta \frac{d^3 P_l(\cos \theta)}{d(\cos \theta)^3} \right]}_{(2)}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} (2) &= e^{3i\phi} \left(\frac{d}{d\theta} - 2 \cot \theta \right) \left[\sin^2 \theta \frac{d^2 P_l(\cos \theta)}{d(\cos \theta)^2} \right] \\ &= e^{3i\phi} \sin^2 \theta \frac{d}{d\theta} \left[\frac{1}{\sin^2 \theta} \sin^2 \theta \frac{d^2 P_l(\cos \theta)}{d(\cos \theta)^2} \right] = -e^{3i\phi} \sin^3 \theta \frac{d^3 P_l(\cos \theta)}{d(\cos \theta)^3}, \\ \therefore Y_{l3}(\theta, \phi) &= -e^{3i\phi} \sqrt{\frac{(2l+1)(l-3)!}{4\pi(l+3)!}} \sin^3 \theta \frac{d^3 P_l(\cos \theta)}{d(\cos \theta)^3}. \end{aligned}$$

球面調和関数

結局，次を得る．

$$Y_{lm}(\theta, \phi) = (-1)^m \sqrt{\frac{(2l+1)(l-m)!}{4\pi(l+m)!}} \sin^m \theta \frac{d^m P_l(\cos \theta)}{d(\cos \theta)^m} \\ (l = 0, 1, 2, \dots; m = 0, 1, 2, \dots, l).$$

一方， $Y_{l0}(\theta, \phi)$ に下降演算子 \hat{l}_- を順次作用させることにより次を得る．

$$Y_{l,-m}(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{(2l+1)(l-m)!}{4\pi(l+m)!}} \sin^m \theta \frac{d^m P_l(\cos \theta)}{d(\cos \theta)^m} \\ (l = 0, 1, 2, \dots; m = 0, 1, 2, \dots, l).$$

Legendre 陪関数，球面調和関数

球面調和関数

$$Y_{lm}(\theta, \phi) = (-1)^{(m+|m|)/2} \sqrt{\frac{(2l+1)(l-|m|)!}{4\pi(l+|m|)!}} e^{im\phi} P_l^{|m|}(\cos \theta)$$
$$(l = 0, 1, 2, \dots; m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l),$$

ここで、 $P_l^{|m|}(\cos \theta)$ は Legendre 陪関数

$$P_l^m(x) = (-1)^m (1-x^2)^{m/2} \frac{d^m P_l(x)}{dx^m},$$

i.e., $P_l^m(\cos \theta) = \sin^m \theta \frac{d^m P_l(\cos \theta)}{d(\cos \theta)^m}$

$$(l = 0, 1, 2, \dots; m = 0, 1, 2, \dots, l),$$

- ① はじめに
- ② 角運動量演算子とその固有状態
- ③ 球面調和関数
- ④ 球面調和関数のグラフ**
- ⑤ Legendre 多項式／陪関数の諸公式
- ⑥ まとめ
- ⑦ 補遺 1：Laplacian の極座標表示
- ⑧ 補遺 2：Legendre 多項式の母関数

球面調和関数のグラフ

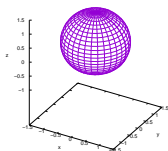
球面上に球面調和関数 ↓ のグラフを描いた.

$$Y_{lm}^{(s)}(\theta, \phi) := \sqrt{\frac{(2l+1)(l-m)!}{4\pi(l+m)!}} P_l^m(\theta) \sin m\phi \quad (l = 0, 1, 2, \dots, m = 0, 1, 2, \dots, l)$$

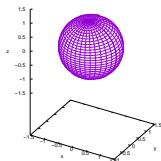
i.e., 次のようにパラメータ表示された曲面の 3 次元グラフを描いた.

$$\begin{cases} x = r(\theta, \phi) \sin \theta \cos \phi, \\ y = r(\theta, \phi) \sin \theta \sin \phi, \\ z = r(\theta, \phi) \cos \theta, \end{cases}$$
$$r(\theta, \phi) = 1 + 0.5Y_{lm}^{(s)}(\theta, \phi),$$
$$0 \leq \theta \leq \pi, 0 \leq \phi \leq 2\pi.$$

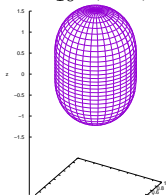
球面調和関数のグラフ



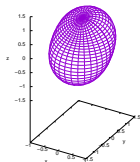
$$Y_{10}^{(S)}(\theta, \phi)$$



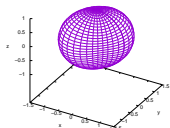
$$Y_{11}^{(S)}(\theta, \phi)$$



$$Y_{20}^{(S)}(\theta, \phi)$$

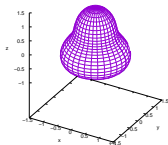


$$Y_{21}^{(S)}(\theta, \phi)$$

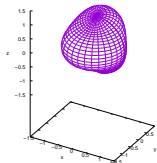


$$Y_{22}^{(S)}(\theta, \phi)$$

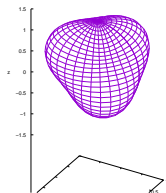
球面調和関数のグラフ



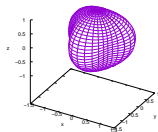
$$Y_{30}^{(S)}(\theta, \phi)$$



$$Y_{31}^{(S)}(\theta, \phi)$$



$$Y_{32}^{(S)}(\theta, \phi)$$



$$Y_{33}^{(S)}(\theta, \phi)$$

波動関数は上のような球面上の波動の一次結合に展開される。

- ① はじめに
- ② 角運動量演算子とその固有状態
- ③ 球面調和関数
- ④ 球面調和関数のグラフ
- ⑤ Legendre 多項式／陪関数の諸公式
- ⑥ まとめ
- ⑦ 補遺 1：Laplacian の極座標表示
- ⑧ 補遺 2：Legendre 多項式の母関数

Legendre 多項式／陪関数の諸公式

球面調和関数の量子力学的波動関数としての諸性質から、球面調和関数に関する Legendre 多項式／陪関数の諸性質を導出する。

球面調和関数 $Y_{lm}(\theta, \phi)$ は角運動量演算子 \hat{l}^2 の固有関数である。

$$\begin{aligned}\hat{l}^2 Y_{lm}(\theta, \phi) &= \hbar^2 l(l+1) Y_{lm}(\theta, \phi) \\ (l &= 0, 1, 2, \dots; m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l).\end{aligned}$$

$Y_{lm}(\theta, \phi)$, \hat{l}^2 の具体的表式を代入する。

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

Legendre の陪微分方程式

$$\frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left[\sin \theta \frac{dP_l^m(\cos \theta)}{d\theta} \right] + \left[l(l+1) - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} \right] P_l^m(\cos \theta) = 0,$$

i.e.,

$$\frac{d}{dx} \left[(1-x^2) \frac{dP_l^m(x)}{dx} \right] + \left[l(l+1) - \frac{m^2}{1-x^2} \right] P_l^m(x) = 0$$

($l = 0, 1, 2, \dots, m = 0, 1, 2, \dots, l$).

とくに,

$$\frac{d}{dx} \left[(1-x^2) \frac{dP_l(x)}{dx} \right] + l(l+1)P_l(x) = 0 \quad (l = 0, 1, 2, \dots)$$

Legendre の微分方程式.

固有状態 $\{|l, m\rangle\}$ の正規直交関係.

$$\langle l, m | l', m' \rangle = \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi d\theta \sin \theta Y_{lm}(\theta, \phi)^* Y_{l'm'}(\theta, \phi) = \delta_{ll'} \delta_{mm'}.$$

これに $Y_{lm}(\theta, \phi)$ の表式を代入する.

$$Y_{lm}(\theta, \phi) = (-1)^m \sqrt{\frac{(2l+1)(l-m)!}{4\pi(l+m)!}} P_l^m(\cos \theta) e^{im\phi}$$

$$(l = 0, 1, 2, \dots, m = 0, 1, 2, \dots, l).$$

直交関係式

$$\int_{-1}^1 dx P_l^m(x) P_{l'}^m(x) = \frac{2}{2l+1} \frac{(l+m)!}{(l-m)!} \delta_{ll'},$$

とくに,

$$\int_{-1}^1 dx P_l(x) P_{l'}(x) = \frac{2}{2l+1} \delta_{ll'}.$$

Legendre 多項式に関するその他の公式 (の例).

- 母関数.

$$\frac{1}{\sqrt{1-2xt+t^2}} = \sum_{l=0}^{\infty} t^l P_l(x) \quad (|t| < 1).$$

- 漸化式

$$(1-x^2) \frac{dP_l(x)}{dx} = -lxP_l(x) + lP_{l-1}(x)$$

$$(1-x^2) \frac{dP_l(x)}{dx} = (l+1)xP_l(x) - (l+1)P_{l+1}(x),$$

$$P_{l+1}(x) = \frac{2l+1}{l+1} xP_l(x) - \frac{l}{l+1} P_{l-1}(x).$$

第3式は第1・2式から $P'_l(x)$ を消去して得られる.

これらの公式は「量子力学的考察」では導出できなかった.

Legendre 多項式 / 陪関数の諸公式

Legendre 多項式の母関数.

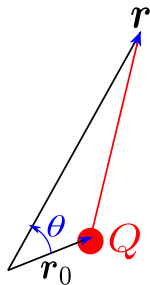
- ここでは物理的意味を述べる.
- 証明は「補遺」に示す (概要欄に PC スライドを置く URL を記してあります).

点 \mathbf{r}_0 の電荷 Q がつくる, 点 \mathbf{r} における Coulomb ポテンシャル.

... Legendre 多項式の母関数を用いて次のように表される.

$$\begin{aligned}\frac{Q}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|} &= \frac{Q}{r} \sum_{l=0}^{\infty} \left(\frac{r_0}{r}\right)^l P_l(\cos \theta) \quad (r > r_0) \\ &= \frac{Q}{r} + \frac{\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}}{r^3} + \dots,\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}r &= |\mathbf{r}|, & r_0 &= |\mathbf{r}_0|, & \theta &: \mathbf{r} \text{ と } \mathbf{r}_0 \text{ のなす角,} \\ \mathbf{p} &= Q\mathbf{r}_0 & \text{電気双極子.}\end{aligned}$$



静電場の多重極展開

漸化式.

$$(1-x^2) \frac{dP_l(x)}{dx} = -lxP_l(x) + lP_{l-1}(x),$$

$$(1-x^2) \frac{dP_l(x)}{dx} = (l+1)xP_l(x) - (l+1)P_{l+1}(x).$$

これらは次のように表される.

Legendre 多項式の漸化式

$$P_l(x) = \frac{1}{l} \mathcal{D}_l^{(+)} P_{l-1}(x), \quad P_{l-1}(x) = \frac{1}{l} \mathcal{D}_l^{(+)} P_l(x),$$

$$\mathcal{D}_l^{(\pm)} := \mp(1-x^2) \frac{d}{dx} + lx.$$

$\mathcal{D}_l^{(\pm)}$ は「昇降演算子」である.

Legendre 多項式 / 陪関数の諸公式

【Legendre 多項式の漸化式の証明】

通常は Legendre 多項式の母関数を用いて証明するが、次のようにしても証明できる。
まず、微分演算子

$$\mathcal{D}_l^{(\pm)} := \mp(1-x^2) \frac{d}{dx} + lx.$$

が次の等式を満たすことが示される。

$$\mathcal{D}_l^{(+)} \mathcal{D}_l^{(-)} = -(1-x^2) \left[\frac{d}{dx} \left((1-x^2) \frac{d}{dx} \right) + l(l+1) \right] + l^2,$$

$$\mathcal{D}_l^{(-)} \mathcal{D}_l^{(+)} = -(1-x^2) \left[\frac{d}{dx} \left((1-x^2) \frac{d}{dx} \right) + l(l-1) \right] + l^2.$$

したがって、次が成り立つ。

$$l \text{ 次 Legendre 微分方程式 } \frac{d}{dx} \left[(1-x^2) \frac{dw}{dx} \right] + l(l+1)w = 0$$

$$\iff \mathcal{D}_l^{(+)} \mathcal{D}_l^{(-)} w = l^2 w$$

$$\iff \mathcal{D}_{l+1}^{(-)} \mathcal{D}_{l+1}^{(+)} w = (l+1)^2 w.$$

Legendre 多項式 / 陪関数の諸公式

$P_{l-1}(x)$ は $(l-1)$ 次 Legendre 微分方程式と同値な方程式

$$\mathcal{D}_l^{(-)} \mathcal{D}_l^{(+)} P_{l-1} = l^2 P_{l-1}$$

を満たすから、両辺に $\mathcal{D}_l^{(+)}$ を作用させて、

$$\mathcal{D}_l^{(+)} \mathcal{D}_l^{(-)} \mathcal{D}_l^{(+)} P_{l-1} = l^2 \mathcal{D}_l^{(+)} P_{l-1}.$$

したがって、 $w = \mathcal{D}_l^{(+)} P_{l-1}$ は l 次 Legendre 微分方程式 (と同値な方程式)
 $\mathcal{D}_l^{(+)} \mathcal{D}_l^{(-)} w = l^2 w$ を満たす。

微分方程式の理論より、 l 次 Legendre 微分方程式のもう一つの独立解 (第 2 種 Legendre 関数 $Q_l(x)$) は $\log((x+1)/(x-1))$ の特異性を持つから、
多項式 $\mathcal{D}_l^{(+)} P_{l-1}(x)$ は

$$\mathcal{D}_l^{(+)} P_{l-1}(x) = C P_l(x) \quad (C : \text{const.})$$

と書ける。

定数係数 C は両辺の最高次係数を比較して決める。

Legendre 多項式 / 陪関数の諸公式

$$\mathcal{D}_l^{(+)} P_{l-1}(x) = C P_l(x) \quad (C : \text{const.})$$

- $P_l(x)$ の最高次係数は

$$P_l(x) = \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l}{dx^l} (x^2 - 1)^l = \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l}{dx^l} (x^{2l} + \dots)$$

より $\frac{1}{2^l l!} \frac{(2l)!}{l!} = \frac{(2l-1)!!}{l!}$.

-

$$\mathcal{D}_l^{(+)} P_{l-1}(x) = \left[(x^2 - 1) \frac{d}{dx} + lx \right] \left[\frac{(2l-3)!!}{(l-1)!} x^{l-1} + \dots \right]$$

の最高次係数は $\frac{(2l-1)!!}{(l-1)!}$ と計算される.

以上より, $C = l$. $\mathcal{D}_l^{(+)} P_{l-1} = l P_l$.

(第 1 式の証明終わり)

第 2 式の証明: 次により $\mathcal{D}_l^{(+)} P_l(x) = l P_{l-1}(x)$ が示される.

$$l \mathcal{D}_l^{(+)} P_l(x) = \mathcal{D}_l^{(-)} \mathcal{D}_l^{(+)} P_{l-1}(x) = l^2 P_{l-1}(x)$$

(2 番目の等号は $l-1$ 次 Legendre 微分方程式と同値な方程式)



- 1 はじめに
- 2 角運動量演算子とその固有状態
- 3 球面調和関数
- 4 球面調和関数のグラフ
- 5 Legendre 多項式／陪関数の諸公式
- 6 まとめ**
- 7 補遺 1：Laplacian の極座標表示
- 8 補遺 2：Legendre 多項式の母関数

まとめ

- 球面調和関数 $Y_{lm}(\theta, \phi)$: 角運動量演算子 \hat{l}^2, \hat{l}_z の固有関数.
- 角運動量演算子の代数的関係式から \hat{l}^2, \hat{l}_z の固有値を導出した.
- 「昇降演算子」を用いて球面調和関数の具体形を導出した.
- Legendre 多項式 / 陪関数の直交関係式, Legendre 多項式の漸化式.

まとめ

- 球面調和関数 $Y_{lm}(\theta, \phi)$: 角運動量演算子 \hat{l}^2, \hat{l}_z の固有関数.
- 角運動量演算子の代数的関係式から \hat{l}^2, \hat{l}_z の固有値を導出した.
- 「昇降演算子」を用いて球面調和関数の具体形を導出した.
- Legendre 多項式 / 陪関数の直交関係式, Legendre 多項式の漸化式.

昇降演算子が特殊関数の議論に大きな役割を果たしている.

(これは Hermite 多項式 (調和振動子問題) でも同様だった)

上昇演算子 \mathcal{A}_+ , 下降演算子 \mathcal{A}_- を用いて固有値方程式が

$$\mathcal{A}_- \mathcal{A}_+ w = \lambda w$$

と書けると, 固有関数としての特殊関数が求められるようである.

- $\mathcal{A}_\pm w_0 = 0 \rightarrow$ 種となる関数 w_0 .
- \mathcal{A}_\pm を w_0 に順次作用 \rightarrow 固有関数 (特殊関数).

補遺 1 : Laplacian の極座標表示

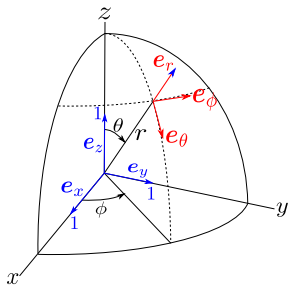
極座標 (r, θ, ϕ)

$$x = r \sin \theta \cos \phi$$

$$y = r \sin \theta \sin \phi$$

$$z = r \cos \theta,$$

$$0 < r < \infty, 0 \leq \theta \leq \pi, 0 \leq \phi \leq 2\pi.$$



r, θ, ϕ 方向の単位基底ベクトル.

$$\mathbf{e}_r = \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial r} \bigg/ \left| \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial r} \right| = \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial r},$$

$$\mathbf{e}_\theta = \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial \theta} \bigg/ \left| \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial \theta} \right| = \frac{1}{r} \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial \theta},$$

$$\mathbf{e}_\phi = \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial \phi} \bigg/ \left| \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial \phi} \right| = \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial \phi}.$$

Laplacian の極座標表示

$$\Delta f = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{1}{r^2} \frac{\partial f}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial f}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 f}{\partial \phi^2}.$$

【証明】 $\Delta f = \operatorname{div}(\operatorname{grad} f)$ を用いる.

- $\operatorname{grad} f$ の極座標表示.

$$\begin{aligned} \operatorname{grad} f &= (\operatorname{grad} f)_r \mathbf{e}_r + (\operatorname{grad} f)_\theta \mathbf{e}_\theta + (\operatorname{grad} f)_\phi \mathbf{e}_\phi, \\ (\operatorname{grad} f)_\theta &= \operatorname{grad} f \cdot \mathbf{e}_\theta \\ &= \left(\frac{\partial f}{\partial x} \mathbf{e}_x + \frac{\partial f}{\partial y} \mathbf{e}_y + \frac{\partial f}{\partial z} \mathbf{e}_z \right) \cdot \frac{1}{\partial r} \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial \theta} \\ &= \frac{1}{r} \left(\frac{\partial f}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial \theta} + \frac{\partial f}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial \theta} + \frac{\partial f}{\partial z} \frac{\partial z}{\partial \theta} \right) = \frac{1}{r} \frac{\partial f}{\partial \theta}. \end{aligned}$$

などから,

$$\operatorname{grad} f = \frac{\partial f}{\partial r} \mathbf{e}_r + \frac{1}{r} \frac{\partial f}{\partial \theta} \mathbf{e}_\theta + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial f}{\partial \phi} \mathbf{e}_\phi.$$

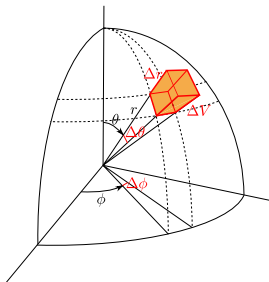
- $\text{div } \mathbf{A}$ の極座標表示.

$$\mathbf{A} = A_r \mathbf{e}_r + A_\theta \mathbf{e}_\theta + A_\phi \mathbf{e}_\phi.$$

微小体積要素 ΔV 表面上の \mathbf{A} の面積分
を考えると, Gauss の発散定理より

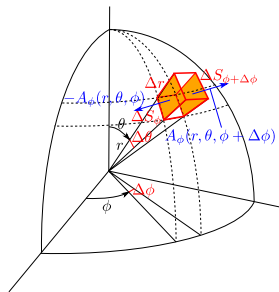
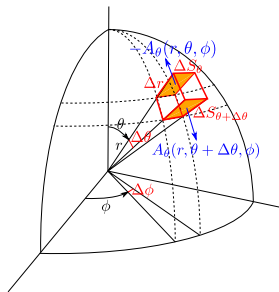
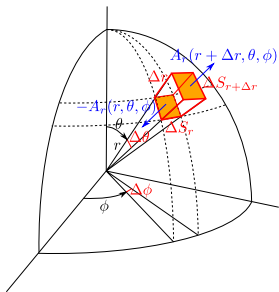
$$(\text{div } \mathbf{A})\Delta V = \int_{\partial(\Delta V)} \mathbf{A} \cdot \mathbf{n} dS.$$

右辺の面積分を変形する.



補遺 1 : Laplacian の極座標表示

$$\begin{aligned}
 (\operatorname{div} \mathbf{A})\Delta V &= (\operatorname{div} \mathbf{A})r^2 \sin \theta \Delta r \Delta \theta \Delta \phi \\
 &= A_r(r + \Delta r, \theta, \phi) \cdot \underbrace{(r + \Delta r)^2 \sin \theta \Delta \theta \Delta \phi}_{\Delta S_{r+\Delta r}} - A_r(r, \theta, \phi) \cdot \underbrace{r^2 \sin \theta \Delta \theta \Delta \phi}_{\Delta S_r} \\
 &\quad + A_\theta(r, \theta + \Delta \theta, \phi) \underbrace{r \sin(\theta + \Delta \theta) \Delta r \Delta \phi}_{S_{\theta+\Delta \theta}} - A_\theta(r, \theta, \phi) \underbrace{r \sin \theta \Delta r \Delta \phi}_{\Delta S_\theta} \\
 &\quad + A_\phi(r, \theta, \phi + \Delta \phi) \underbrace{r \Delta r \Delta \theta}_{\Delta S_{\phi+\Delta \phi}} - A_\phi(r, \theta, \phi) \underbrace{r \Delta r \Delta \theta}_{\Delta S_\phi}
 \end{aligned}$$



補遺 1 : Laplacian の極座標表示

両辺を $\Delta V = r^2 \sin \theta \Delta r \Delta \theta \Delta \phi$ で割って,

$$\begin{aligned}\operatorname{div} \mathbf{A} &= \frac{1}{r^2 \Delta r} [(r + \Delta r)^2 A_r(r + \Delta r, \theta, \phi) - r^2 A_r(r, \theta, \phi)] \\ &\quad + \frac{1}{r \sin \theta \Delta \theta} [\sin(\theta + \Delta \theta) A_\theta(r, \theta + \Delta \theta, \phi) - \sin \theta A_\theta(r, \theta, \phi)] \\ &\quad + \frac{1}{r \sin \theta \Delta \phi} [A_\phi(r, \theta, \phi + \Delta \phi) - A_\phi(r, \theta, \phi)].\end{aligned}$$

$\Delta r, \Delta \theta, \Delta \phi \rightarrow 0$ として,

$$\begin{aligned}\therefore \operatorname{div} \mathbf{A} &= \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 A_r) + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} (\sin \theta A_\theta) + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial A_\phi}{\partial \phi}. \\ \operatorname{grad} f &= \frac{\partial f}{\partial r} \mathbf{e}_r + \frac{1}{r} \frac{\partial f}{\partial \theta} \mathbf{e}_\theta + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial f}{\partial \phi} \mathbf{e}_\phi.\end{aligned}$$

$\Delta f = \operatorname{div}(\operatorname{grad} f)$ より,

Laplacian の極座標表示

$$\Delta f = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial f}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial f}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 f}{\partial \phi^2}.$$

Legendre 多項式の母関数

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

【証明】 Legendre 多項式の表式

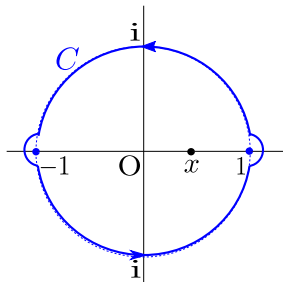
$$P_l(x) = \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l}{dx^l} (x^2 - 1)^l$$

から、複素関数論における Goursat の定理より、

$$P_l(x) = \frac{1}{2^l \cdot 2\pi i} \oint_C \frac{(z^2 - 1)^l}{(z - x)^{l+1}} dz$$

(C : 右図の複素積分路). よって、

$$\sum_{l=0}^{\infty} t^l P_l(x) = \frac{1}{2\pi i} \sum_{l=0}^{\infty} \oint_C \frac{1}{z - x} \left[\frac{t(z^2 - 1)}{2(z - x)} \right]^l dz$$



補遺 2: Legendre 多項式の母関数

積分と無限和の順序を交換して (交換可能性については後述),

$$\begin{aligned}\sum_{l=0}^{\infty} t^l P_l(x) &= \frac{1}{2\pi i} \oint_C \frac{1}{z-x} \frac{1}{1 - \frac{t(z^2-1)}{2(z-x)}} dz \\ &= \frac{-2t^{-1}}{2\pi i} \oint_C \frac{dz}{z^2 - 2t^{-1}z + 2t^{-1}x - 1}.\end{aligned}\tag{1}$$

被積分関数の分母は次の点に 1 位の零点を持つ.

$$z_{\pm} = t^{-1} \pm \sqrt{t^{-2} - 2t^{-1}x + 1} = \frac{1}{t} + \sqrt{\frac{1}{t^2} - \frac{2x}{t} + 1}, \frac{2x-t}{1 + \sqrt{1 - 2xt + t^2}}.$$

$t \rightarrow 0$ とすると $z_+ \rightarrow \infty$, $z_- \rightarrow 2x$ となるので, $|t|$ が十分小さければ, 積分路 C 内にある極は z_- であることがわかる. よって, 留数定理により

$$(1) = \frac{2t^{-1}}{z_- - z_+} = \frac{1}{\sqrt{1 - 2xt + t^2}}.$$

一致の定理より, $|t| < 1$ 全体においても同じ等式が成り立つ.

補遺 2 : Legendre 多項式の母関数

積分と無限和の順序交換可能性.

$$\frac{1}{2\pi i} \sum_{l=0}^{\infty} \oint_C \frac{1}{z-x} \left[\frac{t(z^2-1)}{2(z-x)} \right]^l dz = \frac{1}{2\pi i} \oint_C \frac{1}{z-x} \sum_{l=0}^{\infty} \left[\frac{t(z^2-1)}{2(z-x)} \right]^l dz$$

$\sum_{l=0}^{\infty} \left[\frac{t(z^2-1)}{2(z-x)} \right]^l$ が C 上一様収束することを示せばよい.

$$\begin{aligned} 2|z^2-1| &= 2|z-1||z+1| \\ &= 2 \times \text{直角三角形の面積} = 2|\operatorname{Im} z| < 2|z-t| \end{aligned}$$

より,

$$\left| \frac{t(z^2-1)}{2(z-x)} \right| < |t|.$$

$|t| < 1$ なので, $\sum_{l=0}^{\infty} \left[\frac{t(z^2-1)}{2(z-x)} \right]^l$ は C 上一様収束する. \square

