

方向 $(\mathbf{q}_n, \varphi_n)$ と方向 $(\mathbf{q}_e, \varphi_e)$ のベクトルのなす角を \mathbf{q} とすると、下の公式「球面調和関数の加法定理」が成立することを以下の手順で求めよ(この定理は散乱問題や電荷分布の多重極展開などで使われる)。 $P_l(\cos \mathbf{q})$ はルジャンドル関数、 $Y_l^{\pm m}(\mathbf{q}_n, \varphi_n)$ 等は球面調和関数。

$$P_l(\cos \mathbf{q}) = \frac{4\mathbf{P}}{2l+1} \sum_{m=-l}^{+l} (-1)^m Y_l^m(\mathbf{q}_n, \varphi_n) Y_l^{-m}(\mathbf{q}_e, \varphi_e)$$

証明方針概要のヒント $P_l(\cos \mathbf{q})$ を、角運動量 \vec{l}_e, \vec{l}_n を持つ二つの波動関数が合成された状態 $P_l(\cos \mathbf{q}) \equiv \Psi(\mathbf{q}_n, \mathbf{q}_e, \mathbf{q}_e)$ とみなして、その合成角運動量 $\vec{L} = \vec{l}_e + \vec{l}_n$ の大きさを調べると、 $L^2 = 0, L_z = 0$ となっていることがわかる。よって、 $P_l(\cos \mathbf{q})$ を角運動量の合成則を用いて書き表せば、加法定理となる。

(1) 次の関係式を示せ(ヒント：方向 $(\mathbf{q}_n, \varphi_n)$ 及び $(\mathbf{q}_e, \varphi_e)$ を向いた単位ベクトルの内積である)

$$\cos \mathbf{q} = \sin \mathbf{q}_n \sin \mathbf{q}_e \cos \varphi_n \cos \varphi_e + \sin \mathbf{q}_n \sin \mathbf{q}_e \sin \varphi_n \sin \varphi_e + \cos \mathbf{q}_n \cos \mathbf{q}_e$$

(2) $(\mathbf{q}_n, \varphi_n)$ に対する角運動量演算子 \hat{l}_n を、 \mathbf{q}_n 及び φ_n を使って表せ。なお、同様に $(\mathbf{q}_e, \varphi_e)$ に対する角運動量演算子 \hat{l}_e も全く同じ形になる。(ヒント： $\vec{l} \equiv \vec{r} \times \vec{p}$ を極座標表示するだけ)

(3) 関係式 $\hat{l}_n^2 P_l(\cos \mathbf{q}) = \hat{l}_e^2 P_l(\cos \mathbf{q}) = l(l+1)P_l(\cos \mathbf{q})$ を示せ。

(ヒント：問1の結果に \vec{l}_e, \vec{l}_n を丁寧に作用させたものをルジャンドル微分方程式と比較せよ)

(4) $\hat{L}_z = \hat{l}_{nz} + \hat{l}_{ez}$ に対し、 $\hat{L}_z P_l(\cos \mathbf{q}) = 0$ を示し、 $\hat{L}_x P_l(\cos \mathbf{q}) = 0$ 及び $\hat{L}_y P_l(\cos \mathbf{q}) = 0$ も成立していることを説明せよ。(ヒント： $\hat{L}_z = \hat{l}_{nz} + \hat{l}_{ez} = \frac{\partial}{\partial \varphi_n} + \frac{\partial}{\partial \varphi_e}$ などを丁寧に作用させるだけ。

L_x, L_y の計算は多少煩雑。

(5) 以上から、 $P_l(\cos \mathbf{q})$ は大きさが l の角運動量を持った二つの波動関数 $Y_l^m(\mathbf{q}_n, \varphi_n)$ 、及び

$Y_l^m(\mathbf{q}_e, \varphi_e)$ を合成して出来る状態(但し $L=0$, $M \equiv L_z=0$ の角運動量を持つ)であることを説明せよ。(ヒント: 合成前の角運動量は \vec{l}_e, \vec{l}_n で、合成後は \vec{L} である。 \vec{L} は前問で調べてある)。

(6) 以上より、 P_l を二つの角運動量 $Y_l^m(\mathbf{q}_n, \varphi_n)$, $Y_l^m(\mathbf{q}_e, \varphi_e)$ の合成されたものと考えれば、 c を比例定数として角運動量合成則

$$P_l(\cos \mathbf{q}) = c \sum_{m=-l}^{+l} (l, l, m, -m | 0, 0) Y_l^m(\mathbf{q}_n, \varphi_n) Y_l^{-m}(\mathbf{q}_e, \varphi_e)$$

が成り立つことがわかる。ここで、 $(\mathbf{q}_e, \varphi_e) = (0, 0)$ としてみると、上式の和において、 $m=0$ の項だけが寄与することになることを示せ。(ヒント: $(\mathbf{q}_e, \varphi_e) = (0, 0)$ のとき、 $\cos \mathbf{q} = \cos \mathbf{q}_n$ であり、 φ_n に依存しない。よって $Y_l^m(\mathbf{q}_n, \varphi_n)$ の φ_n 依存性を考えればよい)。

$$(7) \text{ } \text{そこで、 } Y_l^0(\mathbf{q}, \varphi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} P_l(\cos \mathbf{q}), \quad Y_l^0(0, 0) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}, \quad (l, l, m, -m | 0, 0) = \frac{(-1)^{l-m}}{\sqrt{2l+1}}$$

を使い、比例定数 c を求めよ。そして、その結果が最初に与えられた「加法定理」になっていることを確かめよ。(ヒント: 代入するだけ)。

(8) やさしい応用例として、電荷密度 $\mathbf{r}_e(\vec{r}_e)$ の電子雲の中にある、電荷密度 $\mathbf{r}_n(\vec{r}_n)$ の原子核の静電エネルギー $E = \int d\vec{r}_e \int d\vec{r}_n \frac{\mathbf{r}_e(\vec{r}_e) \mathbf{r}_n(\vec{r}_n)}{|\vec{r}_e - \vec{r}_n|}$ を、球面調和関数の積で展開せよ。

そして、 $l=0, 1, 2$ の各項の意味を考えよ。

(ヒント: まず、ルジャンドル多項式(No.5)の母関数展開 $1/\sqrt{1-2z \cos \mathbf{q} + z^2} = \sum_{l=0}^{\infty} P_l(\cos \mathbf{q}) z^l$

を使って分母を展開し、その結果に加法定理を適用し、 $E = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{+l} \int \int d\vec{r}_e d\vec{r}_n \dots$ の形に整理

する。 $l=0, 1, 2$ の各項は電荷、双極子、四重極子の静電エネルギーとなっている。)