

6-3 角度に対する微分方程式

27

角度の部分: $\hat{L}^2 Y(\theta, \varphi) = \lambda Y(\theta, \varphi)$

但し $\hat{L}^2 = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right]$

従って、微分方程式は

$$\left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] Y(\theta, \varphi) = -\frac{\lambda}{\hbar^2} Y(\theta, \varphi)$$

この微分方程式は変数分離型である。ゆえに

$$Y(\theta, \varphi) = X(\theta) \Phi(\varphi) \quad \text{と置く}$$

$$\begin{cases} \frac{d^2 \Phi(\varphi)}{d\varphi^2} = -m^2 \Phi(\varphi) \\ \frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{dX(\theta)}{d\theta} \right) - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} X(\theta) = -\frac{\lambda}{\hbar^2} X(\theta) \end{cases}$$

と置く。但し m は定数

[1] $\Phi(\varphi)$ の解 :

28

$$\frac{d^2 \Phi(\varphi)}{d\varphi^2} = -m^2 \Phi(\varphi)$$

この一般解は

$$\Phi(\varphi) = A e^{im\varphi} + B e^{-im\varphi}$$

222 $\Phi(\varphi)$ は $\boxed{\hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}}$ の固有関数である

と要請する

$$\hat{L}_z \Phi(\varphi) = m\hbar \Phi(\varphi)$$

これより

$$\boxed{\Phi(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi}}$$

と決まる。

① 2312, $\Phi(\varphi)$ が 1 価関数であることと要請する。

$$\boxed{\Phi(\varphi) = \Phi(\varphi + 2\pi)}$$

これより

$m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ の整数

[2] $X(\theta)$ の解:

29

$$\frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{dX(\theta)}{d\theta} \right) - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} X(\theta) = -\frac{\lambda}{h^2} X(\theta)$$

[変数変換] $\begin{cases} x = \cos \theta \\ X(\theta) = P(x) \end{cases}$ 273

$$\frac{dX(\theta)}{d\theta} = \frac{dP(x)}{dx} \frac{dx}{d\theta} = -\sin \theta \frac{dP(x)}{dx}$$

2, 2

$$\frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{dX(\theta)}{d\theta} \right) = \frac{d}{dx} (1-x^2) \frac{dP(x)}{dx}$$

$$\frac{d}{dx} \left((1-x^2) \frac{dP(x)}{dx} \right) - \frac{m^2}{1-x^2} P(x) = -\frac{\lambda}{h^2} P(x)$$

この解の2つ

① 境界条件: $x = \pm 1$ 27 $P(x)$ は有限

[$m=0$ の時]

30

$m=0$ のときは簡単になる

$$\frac{d}{dx} \left((1-x^2) \frac{dP(x)}{dx} \right) + \frac{\lambda}{h^2} P(x) = 0$$

• $P(x) = \sum a_n x^n$ と級数展開する

この式を微分方程式に代入する

$$\sum_n \left[n(n-1) a_n x^{n-2} - n(n+1) a_n x^n \right] + \frac{\lambda}{h^2} \sum_n a_n x^n = 0$$

(x^n の n の $\wedge$ と $\exists$ と $\exists$ と $\exists$ と)

$$\sum_n \left\{ (n+2)(n+1) a_{n+2} - \left[n(n+1) - \frac{\lambda}{h^2} \right] a_n \right\} x^n = 0$$

よって恒等式であるから x^n の係数はゼロ

$$(n+2)(n+1) a_{n+2} = \left[n(n+1) - \frac{\lambda}{h^2} \right] a_n$$

から求まる

① 境界条件 : $x = \pm 1$ で $P(x)$ が有限

よって $n \rightarrow \infty$ まで a_n が重要になる

• $n \gg 1$ のとき: $a_{n+2} \approx a_n$

従って, $x \sim 1$ のとき

$$P(x) \approx \sum a_n x^n \sim a_0 \sum x^n \rightarrow \infty$$

($x \rightarrow 1$)

すなわち $P(1) \rightarrow \infty$ となる

境界条件と矛盾する

$$P(1) \rightarrow \infty$$

これを避けるには

$$n(n+1) - \frac{\lambda}{\hbar^2} = 0$$

となる n が存在する必要がある。

n は整数
(正の)

よって,

$$\lambda = \hbar^2 l(l+1) \quad (l=0, 1, 2, \dots)$$

と書く。

$[m \text{ がい一般の整数}]$

32

$\left\{ \begin{array}{l} \text{解法は 2 解 (9) は 真付 1...} \\ \text{結果は 重要} \end{array} \right.$

$$\lambda = h^2 l(l+1) \quad (l=0, 1, 2, \dots) \quad [\text{同 c}]$$

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

$$(m = -l, \dots, l)$$

但し

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

Legendre の多項式 である

$$\left\{ \begin{array}{l} P_0(x) = 1 \\ P_1(x) = x \\ P_2(x) = \frac{1}{2} (3x^2 - 1) \\ P_3(x) = \frac{1}{2} (5x^3 - 3x) \\ \vdots \end{array} \right.$$

○ 球面調和関数 (Spherical harmonics)

No. _____
Date _____

33

$$\begin{cases} Y_{lm}(\theta, \varphi) = N_l^m P_l^m(\cos \theta) e^{im\varphi} \\ N_l^m = (-1)^m \left[\left(\frac{2l+1}{4\pi} \right) \cdot \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!} \right]^{\frac{1}{2}} \end{cases}$$

$$\begin{cases} \hat{L}^2 Y_{lm}(\theta, \varphi) = \hbar^2 l(l+1) Y_{lm}(\theta, \varphi) \\ \hat{L}_z Y_{lm}(\theta, \varphi) = \hbar m Y_{lm}(\theta, \varphi) \end{cases}$$

【直交性】

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

【Examples】

$$\begin{cases} l=0 & Y_{00} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \\ l=1 & \begin{cases} Y_{1,1}(\theta, \varphi) = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{i\varphi} \\ Y_{1,0}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta \\ Y_{1,-1}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{-i\varphi} \end{cases} \end{cases}$$