7-4 角度に対する微分方程式

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

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

よって微分方程式は

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

これは変数分離型である。よって

$$\boxed{Y(\theta,\varphi) = \chi(\theta)\,\Phi(\varphi)}$$ とおくと

$$\begin{cases} \dfrac{d^2 \Phi(\varphi)}{d\varphi^2} = -m^2 \Phi(\varphi) \\[2ex] \dfrac{1}{\sin\theta} \dfrac{d}{d\theta}\left(\sin\theta \dfrac{d\chi(\theta)}{d\theta}\right) - \dfrac{m^2}{\sin^2\theta}\chi(\theta) = -\dfrac{\lambda}{\hbar^2}\chi(\theta) \end{cases}$$

となる。ここで m は定数

（あとで m が整数になることを知っているので上の様においている）

(a) $\Phi(\varphi)$ の解：

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

この一般解はよく知られているように

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

である。

◉ 条件1： ここで $\Phi(\varphi)$ は $\hat{L}_z$ の固有関数と要請する。

（但し $\hat{L}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}$ ）

すなわち $\hat{L}_z\,\Phi(\varphi) = m\hbar\,\Phi(\varphi)$

これより $B=0$ と決定される。

よって $\boxed{\Phi(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\varphi}}$ と求まる。

但し $\int_0^{2\pi}\Phi^*(\varphi)\,\Phi(\varphi)\,d\varphi = 1$ とした。

◉ 条件2： $\Phi(\varphi)$ は1価関数と要請

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

よって $m = 0, \pm1, \pm2, \cdots$ の整数 となる

(b) $\chi(\theta)$ の解：

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\,\frac{d\chi(\theta)}{d\theta}\right)-\frac{m^2}{\sin^2\theta}\,\chi(\theta)=-\frac{\lambda}{\hbar^2}\chi(\theta)$$

を解けばよい.（但し一般の m ではむつかしい）

［変数変換］

$$\begin{cases} x=\cos\theta \\ \chi(\theta)=P(x) \end{cases}$$ とおきかえる.

この時：

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

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

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

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

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

を解けばよい

◎ 境界条件 ： $x=\pm1$ で $P(\pm1)$ が有限

【 $m=0$ の時 】

$m=0$ の時は簡単になる!!

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

- 級数展開： $P(x)=\sum a_n x^n$ とする

これを上式に代入すると

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

x^n にべきをそろえる

$n\to n+2$ とする

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

これは恒等式だから x^n の係数はゼロ.

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

- 境界条件は $x=\pm1$ で $P(\pm1)$ が有限

よって $n\to\infty$ のところが重要.

[$n \gg 1$ の時]　$a_{n+2} \approx a_n$

よって　$x \sim 1$ のとき

$$P(1) \approx \sum a_n x^n \sim a_0 \sum 1 \to \infty$$

これは境界条件と矛盾する。

これをおさえるには

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

をみたす n が存在しないといけない。

ここで n は正の整数

よって　$\boxed{\lambda = \hbar^2 n(n+1)}$　$(n=0, 1, 2, \cdots)$

通常この量子数を l とかき

$$\underline{\lambda = \hbar^2 l(l+1)}$$ となる

$(l=0, 1, 2, \cdots)$

（注：この取扱いでは $P(x)$ が偶関数か奇関数になっていることを使っている）

【mが一般の整数】

（解析的に解くのは難しい…
結果がどこに載っているか書こう）

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

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

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

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

（ Legendre の多項式という ）

$$\begin{cases} P_0(x) = 1 \ , \quad P_1(x) = x \ , \quad P_2(x) = \frac{1}{2}(3x^2-1) \\ P_3(x) = \frac{1}{2}(5x^3 - 3x) \ , \ \cdots \end{cases}$$

【球面調和関数 (spherical harmonics)】

$$\begin{cases} Y_{\ell m}(\theta\varphi) = N_\ell^m P_\ell^m(\cos\theta)\, e^{im\varphi} \\ N_\ell^m = (-)^m \left[\dfrac{2\ell+1}{4\pi} \dfrac{(\ell-|m|)!}{(\ell+|m|)!} \right]^{\frac{1}{2}} \end{cases}$$

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

- 直交性 : $\displaystyle \int_0^\pi \sin\theta\, d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi\, Y^*_{\ell m}(\theta,\varphi) Y_{\ell' m'}(\theta\varphi) = \delta_{\ell\ell'}\delta_{mm'}$

- $\ell = 0$ $\qquad Y_{00} = \dfrac{1}{\sqrt{4\pi}}$

- $\ell = 1$

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