

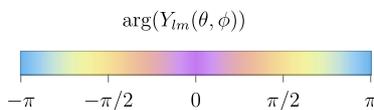
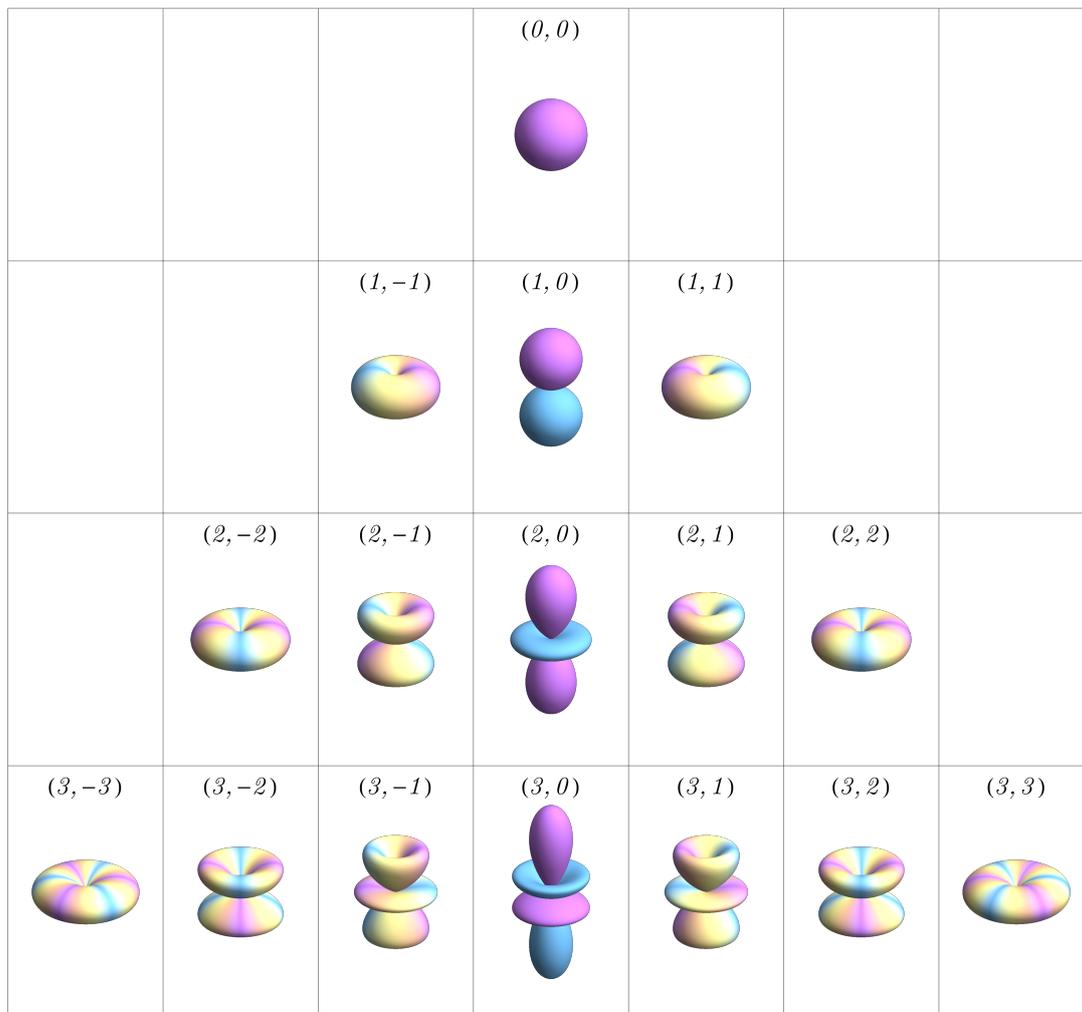
演習問題

2024年6月6日

学籍番号 _____

氏名 _____

[問 1] 球面調和関数 $Y_{lm}(\theta, \phi)$ ($l \leq 3$) の概形を描け。ただし、各方向 (θ, ϕ) について動径 r が $r = |Y_{lm}(\theta, \phi)|$ となるような面を描くものとし、また $\arg(Y_{lm}(\theta, \phi)) = 0$ および $\arg(Y_{lm}(\theta, \phi)) = \pm\pi$ となる方向を濃淡で示すこと。



[問 2]

(1) 球面調和関数の定義

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

を用いて $Y_{00}(\theta, \phi), Y_{21}(\theta, \phi), Y_{32}(\theta, \phi)$ を構成せよ。Legendre 多項式 $P_l(x)$ に対する Rodrigues の公式、および

Legendre 陪関数 $P_l^m(x)$ の定義

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

も参照せよ。

(2) $Y_{00}(\theta, \phi), Y_{21}(\theta, \phi)$ が

$$\int d\Omega Y_{lm}^*(\theta, \phi) Y_{l'm'}(\theta, \phi) = \delta_{ll'} \delta_{mm'},$$

の意味で規格直交化されていることを確かめよ。ここで $\int d\Omega = \int_0^\pi \sin\theta d\theta \int_0^{2\pi} d\phi$ である。

(3) $Y(\theta, \phi) = Y_{21}(\theta, \phi)$ が $l=2$ に対する角度方向の Schrödinger 方程式

$$\frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} Y(\theta, \phi) \right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\phi^2} Y(\theta, \phi) = -l(l+1)Y(\theta, \phi),$$

を満たしていることを確認せよ。

[解 1]

(1) 定義より

$$Y_{00}(\theta, \phi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}, \quad Y_{21}(\theta, \phi) = -\left(\frac{15}{8\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \sin\theta \cos\theta e^{i\phi}, \quad Y_{32}(\theta, \phi) = \left(\frac{105}{32\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \sin^2\theta \cos\theta e^{2i\phi},$$

となる。

(2) それぞれ

$$\begin{aligned} \int d\Omega Y_{00}^*(\theta, \phi) Y_{00}(\theta, \phi) &= \int_0^\pi \sin\theta d\theta \int_0^{2\pi} d\phi \frac{1}{4\pi} = 1, \\ \int d\Omega Y_{21}^*(\theta, \phi) Y_{21}(\theta, \phi) &= \int_0^\pi \sin\theta d\theta \int_0^{2\pi} d\phi \frac{15}{8\pi} \sin^2\theta \cos^2\theta \\ &= \int_{-1}^1 d(\cos\theta) \int_0^{2\pi} d\phi \frac{15}{8\pi} (1 - \cos^2\theta) \cos^2\theta = \frac{15}{8\pi} \cdot \frac{4}{15} \cdot 2\pi = 1, \\ \int d\Omega Y_{00}^*(\theta, \phi) Y_{21}(\theta, \phi) &= \left[\int d\Omega Y_{21}^*(\theta, \phi) Y_{00}(\theta, \phi) \right]^* \\ &= \int_0^\pi \sin\theta d\theta \int_0^{2\pi} d\phi \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \left(\frac{15}{8\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \sin\theta \cos\theta e^{i\phi} \stackrel{\phi\text{積分}}{=} 0, \end{aligned}$$

となるので示された。

(3) $Y_{21}(\theta, \phi) = -\left(\frac{15}{8\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \sin\theta \cos\theta e^{i\phi}$ より

$$\begin{aligned} &\frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} Y(\theta, \phi) \right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\phi^2} Y(\theta, \phi) \\ &= -\left(\frac{15}{8\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \left[\frac{1}{\sin\theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin\theta \frac{d}{d\theta} \sin\theta \cos\theta \right) e^{i\phi} + \frac{1}{\sin^2\theta} \sin\theta \cos\theta \frac{d^2}{d\phi^2} e^{i\phi} \right] \\ &= -\left(\frac{15}{8\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \left[\frac{\cos\theta(\cos^2\theta - 5\sin^2\theta)}{\sin\theta} e^{i\phi} - \frac{\cos\theta}{\sin\theta} e^{i\phi} \right] \\ &= -\left(\frac{15}{8\pi}\right)^{\frac{1}{2}} (-6) \sin\theta \cos\theta e^{i\phi} \\ &= -2(2+1)Y_{21}(\theta, \phi), \end{aligned}$$

となるので示された。

[問 3]

3次元無限井戸型ポテンシャルの下での動径方向の Schrödinger 方程式

$$\frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d}{dr} R(r) \right) - \frac{2mr^2}{\hbar^2} [V(r) - E] R(r) = l(l+1)R(r), \quad V(r) = \begin{cases} 0 & (r \leq a), \\ \infty & (r > a), \end{cases}$$

を考える。整数 $l \geq 0$ は与えられているものとする。

(1) 有効ポテンシャル $V_{\text{eff}}(r) = V(r) + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2}$ は常に正であるから、エネルギーの範囲としては $E > 0$ を考えればよい。1次元 Schrödinger 方程式と同様に $k := \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ を用いると、動径方向の Schrödinger 方程式が $r \leq a$ において

$$\frac{d^2}{dr^2} R(r) + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} R(r) + \left[k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R(r) = 0,$$

となることを示せ。

(2) 任意の実数 α に対して、球 Bessel 関数 $j_\alpha(x)$ および球 Neumann 関数 $n_\alpha(x)$ は、次の $f(x)$ に対する球 Bessel 微分方程式

$$\frac{d^2}{dx^2} f(x) + \frac{2}{x} \frac{d}{dx} f(x) + \left[1 - \frac{\alpha(\alpha+1)}{x^2} \right] f(x) = 0,$$

の2つの独立な解を与えるものとして知られている。整数 $\alpha \geq 0$ に対しては、具体形は

$$j_\alpha(x) = (-x)^\alpha \left(\frac{1}{x} \frac{d}{dx} \right)^\alpha \frac{\sin x}{x}, \quad n_\alpha(x) = -(-x)^\alpha \left(\frac{1}{x} \frac{d}{dx} \right)^\alpha \frac{\cos x}{x},$$

を用いて求めることができる。まず、 $j_l(kr), n_l(kr)$ が動径方向の Schrödinger 方程式を満たすことを示せ。次に、原点 $r = 0$ で $R(r)$ が正則である (発散しない) という条件から、解が球 Bessel 関数 $j_l(kr)$ に限られることを示せ。 $\frac{\sin x}{x}, \frac{\cos x}{x}$ を Taylor 展開し、 $x \rightarrow 0$ で最も発散する項の振る舞いを見るとよい。

[解 2]

(1) 動径方向の Schrödinger 方程式

$$\frac{d^2}{dr^2} R(r) + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} R(r) - \left[\frac{2m(V(r) - E)}{\hbar^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R(r) = 0,$$

において、 $V(r) = 0$ ($r \leq a$) および k の定義式を用いる。

(2) 動径方向の Schrödinger 方程式の両辺を k^2 で割り、 $x = kr$ と置くと球 Bessel 微分方程式に一致するため、 $j_l(kr), n_l(kr)$ が動径方向の Schrödinger 方程式を満たすことが示された。球 Neumann 関数は、 $x \rightarrow 0$ において最も発散する項だけ取り出すと

$$n_\alpha(x) = -(-x)^\alpha \left(\frac{1}{x} \frac{d}{dx} \right)^\alpha \left(\frac{1}{x} - \frac{x}{2} + \dots \right) = -(-x)^\alpha (-1)^\alpha [(2\alpha-1)(2\alpha-3)\dots 1] \frac{1}{x^{\alpha+1}} = -\frac{(2\alpha)!}{2^\alpha \alpha!} \frac{1}{x^{\alpha+1}} + \dots,$$

と振る舞うので、 $n_l(kr)$ は $r \rightarrow 0$ で発散し、 $R(r)$ の解として不適である。また、球 Bessel 関数も同様に $x \rightarrow 0$ に

において最も発散する項だけ取り出すと

$$j_\alpha(x) = (-x)^\alpha \left(\frac{1}{x} \frac{d}{dx} \right)^\alpha \left(1 - \frac{x^2}{6} + \dots \right) = (-x)^\alpha \left(\frac{1}{x} \frac{d}{dx} \right)^\alpha \left[\frac{(-1)^\alpha}{(2\alpha+1)!} x^{2\alpha} \right] = \frac{2^\alpha \alpha!}{(2\alpha+1)!} x^\alpha,$$

と振る舞うので、原点で正則である。よって、解は球 Bessel 関数に限られる。