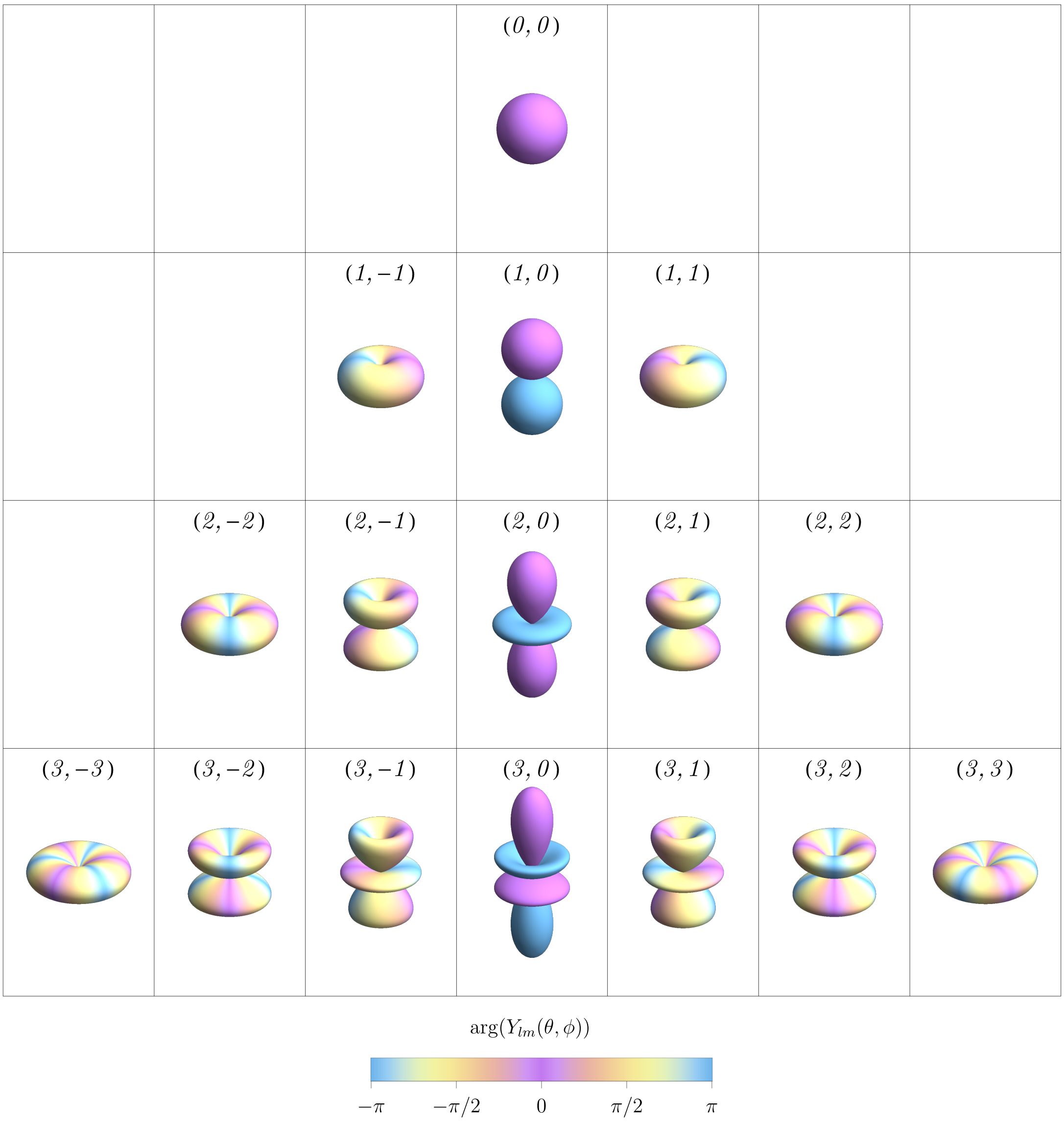
演習問題

2025 年 6 月 19 日　　学籍番号 ＿＿＿＿＿＿＿＿　　氏名 ＿＿＿＿＿＿＿＿

[問 1]　球面調和関数 $Y_{lm}(\theta,\phi)$ $(l \le 3)$ 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。

[解 1]



[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

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

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 2]

(1) 定義より

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

となる。

(2) それぞれ

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

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

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

を考える。整数 $l\ge 0$ は与えられているものとする。

(1)　有効ポテンシャル $V_{\mathrm{eff}}(r)=V(r)+\frac{\hbar^2}{2m}\frac{l(l+1)}{r^2}$ 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 $r\le a$ 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 $\alpha\ge 0$ に対しては、具体形は

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

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、$x\to 0$ で最も発散する項の振る舞いを見るとよい。

[解 3]

(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、$V(r)=0$ $(r\le a)$ 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、$x\to 0$ において最も発散する項だけ取り出すと

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

と振る舞うので、$n_l(kr)$ は $r\to 0$ 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 $x\to 0$ に

おいて最も発散する項だけ取り出すと

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

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。