第 1 章

多極子展開

1.1　古典多極子

1.1.1　電気多極子

スカラーポテンシャル

cgs-Gauss 単位におけるスカラーポテンシャルのポアソン方程式は

$$\nabla^2\phi(\boldsymbol{r}) = -4\pi\rho(\boldsymbol{r}) \tag{1.1}$$

である。これの解はルジャンドル多項式と球面調和関数の加法定理を用いて

$$\begin{aligned}
\phi(\boldsymbol{r}) &= \int d\boldsymbol{r}\frac{\rho(\boldsymbol{r'})}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r'}|} &(1.2)\\
&= \sum_{l=0}^{\infty}\frac{1}{r^{l+1}}\int d\boldsymbol{r'}{r'}^{l}P_l(\cos\theta') &(1.3)\\
&= \sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{l}\frac{1}{r^{l+1}}\int d\boldsymbol{r'}\rho(\boldsymbol{r'}){r'}^{l}Z_l^m(\theta,\varphi)Z_l^{m*}(\theta',\varphi') &(1.4)\\
&= \sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{l}\frac{1}{r^{l+1}}Z_l^m(\theta,\varphi)\left[\int d\boldsymbol{r'}O_l^m(\theta',\varphi')\rho(\boldsymbol{r'})\right] &(1.5)\\
&=: \sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{l}\frac{1}{r^{l+1}}Z_l^m(\theta,\varphi)Q_l^m &(1.6)
\end{aligned}$$

というように整理できる。Notation が増えて申しわけないが、途中で導入した $O_l^m(\theta,\varphi)$, Q_l^m は

$$\begin{aligned}
O_l^m(\boldsymbol{r}) &:= r^l Z_l^*(\theta,\varphi) = \sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}}r^l Y_l^{m*}(\theta,\varphi) &(1.7)\\
Q_l^m &:= \int d\boldsymbol{r'}O_l^m(\theta',\varphi')\rho(\boldsymbol{r'}) &(1.8)
\end{aligned}$$

というのを導入した。これは電気多極子モーメントになっている。実際展開して計算してみよう。$l=0,\ m=0$ は

$$\begin{aligned}
Q_0^0 &= \int d\boldsymbol{r'}Z_0^0(\theta',\varphi')\rho(\boldsymbol{r'}) &(1.9)\\
&= \int d\boldsymbol{r'}\rho(\boldsymbol{r'}) &(1.10)
\end{aligned}$$

で全電荷になっている。電気双極子に相当するものとして $l=1$ のものがある。$l=1,\ m=1$ では

$$\begin{aligned}
Q_1^1 &= \int d\boldsymbol{r'}r'Z_1^{1*}(\theta',\varphi')\rho(\boldsymbol{r'}) &(1.11)\\
&= \int d\boldsymbol{r'}\left\{-\frac{r'\sin\theta'}{\sqrt{2}}e^{-i\varphi'}\right\}\rho(\boldsymbol{r'}) &(1.12)\\
&= \int d\boldsymbol{r'}\left\{-\frac{x+iy}{\sqrt{2}}\right\}\rho(\boldsymbol{r'}), &(1.13)
\end{aligned}$$

$l=1,\, m=0$ では

$$Q_1^0 = \int d\boldsymbol{r'} r' Z_1^0(\theta',\,\varphi')\rho(\boldsymbol{r'}) \tag{1.14}$$

$$= \int d\boldsymbol{r'} r' \cos\theta' \rho(\boldsymbol{r'}) \tag{1.15}$$

$$= \int d\boldsymbol{r'} z\rho(\boldsymbol{r}), \tag{1.16}$$

$l=1,\, m=-1$ では

$$Q_1^{-1} = \int d\boldsymbol{r'} r' Z_1^{-1*}(\theta',\,\varphi')\rho(\boldsymbol{r'}) \tag{1.17}$$

$$= \int d\boldsymbol{r'} \frac{r'\sin\theta'}{\sqrt{2}} e^{-i\varphi'}\rho(\boldsymbol{r'}) \tag{1.18}$$

$$= \int d\boldsymbol{r'} \frac{x+iy}{\sqrt{2}} \rho(\boldsymbol{r'}), \tag{1.19}$$

というようになっている。これは $m=0$ では電気双極子モーメントの z 成分、$m=1$ では電気双極子モーメントの $-(x+iy)/\sqrt{2}$ 成分、$m=-1$ では電気双極子モーメントの $(x-iy)/\sqrt{2}$ 成分、を表している。ここで変な方向の成分が出てきた。これは Spherical basis と呼ばれる基底である。通常の光を直線変更で表したものに対し、円偏光で表したものに相当すると思われる。

また、上の計算を見てわかるように $O_l^{m*}(\boldsymbol{r})$ というのが多極子モーメントの形を決めるのがわかる。$l=2$ の電気四重極子の形を見るため、O_l^m を整理していこう。$l=2,\, m=2$ のとき、

$$O_2^2(\boldsymbol{r}) = r^2\sqrt{\frac{4\pi}{5}} Y_2^{2*}(\theta,\,\varphi) \tag{1.20}$$

$$= r^2\sqrt{\frac{3}{8}}\sin^2\theta(\cos\varphi - i\sin\varphi)^2 \tag{1.21}$$

$$= r^2\sqrt{\frac{3}{8}}\sin^2\theta(\cos^2\varphi - \sin^2\varphi - 2i\cos\varphi\sin\varphi) \tag{1.22}$$

$$= \sqrt{\frac{3}{8}}(x^2-y^2-2ixy) = \sqrt{\frac{3}{8}}(x-iy)^2, \tag{1.23}$$

$l=2,\, m=1$ のとき

$$O_2^1(\boldsymbol{r}) = r^2\sqrt{\frac{4\pi}{5}} Y_2^{1*}(\theta,\,\varphi) = -\sqrt{\frac{3}{2}} r^2 \sin\theta\cos\theta(\cos\varphi - i\sin\varphi) \tag{1.24}$$

$$= \sqrt{\frac{3}{2}}(-xz+iyz) = -\sqrt{\frac{3}{2}} z(x-iy), \tag{1.25}$$

$l=2,\, m=0$ のとき

$$O_2^0 = r^2\sqrt{\frac{4\pi}{5}} Y_2^{0*}(\theta,\,\varphi) \tag{1.26}$$

$$= \frac{r^2}{2}(3\cos^2\theta - 1) = \frac{3z^2-r^2}{2}, \tag{1.27}$$

$l=2,\, m=-1$ のとき

$$O_2^{-1}(\boldsymbol{r}) = r^2\sqrt{\frac{4\pi}{5}} Y_2^{-1*}(\theta,\,\varphi) \tag{1.28}$$

$$= \sqrt{\frac{3}{2}} r^2 \sin\theta\cos\theta(\cos\varphi + i\sin\varphi) \tag{1.29}$$

$$= \sqrt{\frac{3}{2}}(xz+iyz) = \sqrt{\frac{3}{2}} z(x+iy), \tag{1.30}$$

$l=2,\ m=-2$ のとき、

$$O_2^{-2}(\boldsymbol{r}) = r^2\sqrt{\frac{4\pi}{5}}Y_2^{2*}(\theta,\,\varphi) = r^2\sqrt{\frac{3}{8}}\sin^2\theta(\cos\varphi + i\sin\varphi)^2 \tag{1.31}$$

$$= r^2\sqrt{\frac{3}{8}}\sin^2\theta(\cos^2\varphi - \sin^2\varphi + 2i\cos\varphi\sin\varphi) \tag{1.32}$$

$$= \sqrt{\frac{3}{8}}(x^2 - y^2 + 2ixy) = \sqrt{\frac{3}{8}}(x+iy)^2, \tag{1.33}$$

というようになっていく。くどいようだが、最終的には f 電子の物性を考えたいため $l=3$ の電気八極子も展開していく。
$l=3,\ m=3$ のとき

$$O_3^3(\boldsymbol{r}) = r^3\sqrt{\frac{4\pi}{7}}Y_3^{3*}(\theta,\,\varphi) = -\frac{\sqrt{5}r^3}{4}\sin^3\theta(\cos\varphi - i\sin\varphi)^3 \tag{1.34}$$

$$= -\frac{\sqrt{5}r^3}{4}\sin^3\theta(\cos^3\varphi - 3\cos\varphi\sin^2\varphi + i(\sin^3\varphi - 3\cos^2\varphi\sin\varphi)) \tag{1.35}$$

$$= -\frac{\sqrt{5}}{4}\Big\{x^3 - 3xy^2 + i(y^3 - 3x^2y)\Big\} = -\frac{\sqrt{5}}{4}(x-iy)^3, \tag{1.36}$$

$l=3,\ m=2$ のとき

$$O_3^2(\boldsymbol{r}) = r^3\sqrt{\frac{4\pi}{7}}Y_3^{2*}(\theta,\,\varphi) = \frac{\sqrt{30}r^3}{8}\sin^2\theta\cos\theta(\cos\varphi - i\sin\varphi)^2 \tag{1.37}$$

$$= \frac{\sqrt{30}r^3}{8}\sin^2\theta\cos\theta(\cos^2\varphi - \sin^2\varphi - 2i\cos\varphi\sin\varphi) \tag{1.38}$$

$$= \frac{\sqrt{30}}{8}\Big\{zx^2 - zy^2 - 2ixyz\Big\} = \frac{\sqrt{30}}{8}z(x-iy)^2, \tag{1.39}$$

$l=3,\ m=1$ のとき

$$O_3^1(\boldsymbol{r}) = r^3\sqrt{\frac{4\pi}{7}}Y_3^{1*}(\theta,\,\varphi) \tag{1.40}$$

$$= -r^3\sqrt{\frac{3}{16}}\sin\theta(5\cos^2\theta - 1)(\cos\varphi - i\sin\varphi) \tag{1.41}$$

$$= -r^3\sqrt{\frac{3}{16}}\sin\theta(5\cos^2\theta - 1)\Big\{\cos\varphi - i\sin\varphi\Big\} \tag{1.42}$$

$$= -\sqrt{\frac{3}{16}}(5z^2 - r^2)(x-iy), \tag{1.43}$$

$l=3,\ m=0$ のとき

$$O_3^(\boldsymbol{r}) = r^3\sqrt{\frac{4\pi}{7}}Y_3^0(\theta,\,\varphi) \tag{1.44}$$

$$= \frac{r^3}{2}(5\cos^2\theta - 3\cos\theta) \tag{1.45}$$

$$= \frac{z(5z^2 - 3r^2)}{2}, \tag{1.46}$$

$l=3,\ m=-1$ のとき

$$O_3^{-1}(\boldsymbol{r}) = r^3\sqrt{\frac{4\pi}{7}}Y_3^{-1*}(\theta,\,\varphi) \tag{1.47}$$

$$= r^3\sqrt{\frac{3}{16}}\sin\theta(5\cos^2 - 1)(\cos\varphi + i\sin\varphi) \tag{1.48}$$

$$= r^3\sqrt{\frac{3}{16}}\sin\theta(5\cos^2 - 1)\Big\{\cos\varphi + i\sin\varphi\Big\} \tag{1.49}$$

$$= -\sqrt{\frac{3}{16}}(5z^2 - r^2)(x+iy), \tag{1.50}$$

$l=3,\, m=-2$ のとき

$$O_3^{-2}(\boldsymbol{r}) = r^3\sqrt{\frac{4\pi}{7}}Y_3^{-2*}(\theta,\,\varphi) = \frac{\sqrt{30}r^3}{8}\sin^2\theta\cos\theta(\cos\varphi + i\sin\varphi)^2 \tag{1.51}$$

$$= \frac{\sqrt{30}r^3}{8}\sin^2\theta\cos\theta(\cos^2\varphi - \sin^2\varphi + 2i\cos\varphi\sin\varphi) \tag{1.52}$$

$$= \frac{\sqrt{30}}{8}\Big\{zx^2 - zy^2 + 2ixyz\Big\} = \frac{\sqrt{30}}{8}z(x+iy)^2, \tag{1.53}$$

$l=3,\, m=-3$ のとき

$$O_3^{3}(\boldsymbol{r}) = r^3\sqrt{\frac{4\pi}{7}}Y_3^{3*}(\theta,\,\varphi) = \frac{\sqrt{5}r^3}{4}\sin^3\theta(\cos\varphi + i\sin\varphi)^3 \tag{1.54}$$

$$= \frac{\sqrt{5}r^3}{4}\sin^3\theta(\cos^3\varphi - 3\cos\varphi\sin^2\varphi + i(-\sin^3\varphi - 3\cos^2\varphi\sin\varphi)) \tag{1.55}$$

$$= \frac{\sqrt{5}}{4}\Big\{x^3 - 3xy^2 + i(-y^3 - +3x^2y)\Big\} = \frac{\sqrt{5}}{4}(x+iy)^3, \tag{1.56}$$

というようになる。これで多極子展開したときのスカラーポテンシャル

$$\phi(\boldsymbol{r}) = \sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{l} Q_l^m \frac{Z_l^m(\theta,\,\varphi)}{r^{l+1}} \tag{1.57}$$

の中身がわかった。

電場

スカラーポテンシャルがわかったら、電場を調べたくなるものである。なので電場を調べよう。電場はスカラーポテンシャルの勾配であるので、多極子展開したスカラーポテンシャルをいれて計算していくと

$$\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r}) = -\boldsymbol{\nabla}\phi(\boldsymbol{r}) \tag{1.58}$$

$$= \sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{l} Q_l^m \boldsymbol{\nabla}\left(\frac{Z_l^m(\theta,\,\varphi)}{r^{l+1}}\right) \tag{1.59}$$

$$= \sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{l} Q_l^m \left(-\frac{(l+1)Z_l^m(\theta,\,\varphi)}{r^{l+2}}\boldsymbol{e}_r + \frac{\boldsymbol{\nabla}Z_l^m(\theta,\,\varphi)}{r^{l+1}}\right) \tag{1.60}$$

$$\tag{1.61}$$

ここで球面調和関数の微分を行う前に角運動量演算子を思い出そう。3 次元極座標における角運動量演算子は

$$\hat{\boldsymbol{L}} = \hat{\boldsymbol{r}} \times \hat{\boldsymbol{p}} \tag{1.62}$$

$$= -i\left(\boldsymbol{e}_\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} - \boldsymbol{e}_\theta\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) \tag{1.63}$$

であった。これを次のようにする。

$$\frac{i}{r}\boldsymbol{e}_r \times \hat{\boldsymbol{L}} = \frac{1}{r}\left(\boldsymbol{e}_\theta\frac{\partial}{\partial\theta} + \boldsymbol{e}_\varphi\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) \tag{1.64}$$

これはまさに 3 次元極座標における勾配の $\theta,\,\varphi$ 成分である。よって電場は

$$\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r}) = \sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{l}\frac{Q_l^m}{r^{l+2}}\left(\frac{(l+1)\boldsymbol{r}Z_l^m(\theta,\,\varphi) + i\boldsymbol{r}\times\left(\hat{\boldsymbol{L}}Z_l^m(\theta,\,\varphi)\right)}{r}\right) \tag{1.65}$$

となる。後ろの括弧で囲まれた項がベクトル球面調和関数の 1 つとして知られ、都合によりこれを $\sqrt{l+1}$ で割ったもの、

$$\boldsymbol{Z}_{lm}^{(l+1)}(\theta,\,\varphi) := -\frac{(l+1)\boldsymbol{r}Z_l^m(\theta,\,\varphi) + i\boldsymbol{r}\times\left(\hat{\boldsymbol{L}}Z_l^m(\theta,\,\varphi)\right)}{r\sqrt{2l+1}} \tag{1.66}$$

$$\boldsymbol{Y}_{lm}^{(l+1)}(\theta,\,\varphi) := -\frac{(l+1)\boldsymbol{r}Y_l^m(\theta,\,\varphi) + i\boldsymbol{r}\times\left(\hat{\boldsymbol{L}}Y_l^m(\theta,\,\varphi)\right)}{r\sqrt{(l+1)(2l+)}} \tag{1.67}$$

$$\tag{1.68}$$

で定義される。これを使うと電場は

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r}) &= \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{l} \frac{Q_l^m}{r^{l+2}} \boldsymbol{Z}_{lm}^{(l+1)}(\theta,\, \varphi) && (1.69) \\
&= \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{l} \sqrt{4\pi(l+1)} \frac{Q_l^m}{r^{l+2}} \boldsymbol{Y}_{lm}^{(l+1)}(\theta,\, \varphi) && (1.70) \\
& && (1.71)
\end{aligned}
$$

と書ける。