

第 1 章

多極子展開

1.1 電気多極子

1.1.1 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

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

である。こ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

$$\phi(\mathbf{r}) = \int d\mathbf{r}' \frac{\rho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \quad (1.2)$$

$$= \sum_{l=0}^{\infty} \frac{1}{r^{l+1}} \int d\mathbf{r}' \rho(\mathbf{r}') r'^l P_l(\cos \theta') \quad (1.3)$$

$$= \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \frac{1}{r^{l+1}} \int d\mathbf{r}' \rho(\mathbf{r}') r'^l Z_l^m(\theta, \varphi) Z_l^{m*}(\theta', \varphi') \quad (1.4)$$

$$= \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \frac{1}{r^{l+1}} Z_l^m(\theta, \varphi) \left[\int d\mathbf{r}' O_l^m(\theta', \varphi') \rho(\mathbf{r}') \right] \quad (1.5)$$

$$=: \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \frac{1}{r^{l+1}} Z_l^m(\theta, \varphi) Q_l^m \quad (1.6)$$

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

$$O_l^m(\mathbf{r}) := r^l Z_l^{m*}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}} r^l Y_l^{m*}(\theta, \varphi) \quad (1.7)$$

$$Q_l^m := \int d\mathbf{r}' O_l^m(\theta', \varphi') \rho(\mathbf{r}') \quad (1.8)$$

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

$$Q_0^0 = \int d\mathbf{r}' Z_0^0(\theta', \varphi') \rho(\mathbf{r}') \quad (1.9)$$

$$= \int d\mathbf{r}' \rho(\mathbf{r}') \quad (1.10)$$

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

$$Q_1^1 = \int d\mathbf{r}' r' Z_1^{1*}(\theta', \varphi') \rho(\mathbf{r}') \quad (1.11)$$

$$= \int d\mathbf{r}' \left\{ -\frac{r' \sin \theta'}{\sqrt{2}} e^{-i\varphi'} \right\} \rho(\mathbf{r}') \quad (1.12)$$

$$= \int d\mathbf{r}' \left\{ -\frac{x+iy}{\sqrt{2}} \right\} \rho(\mathbf{r}'), \quad (1.13)$$

$l = 1, m = 0$ では

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

$$= \int d\mathbf{r}' r' \cos \theta' \rho(\mathbf{r}') \quad (1.15)$$

$$= \int d\mathbf{r}' z \rho(\mathbf{r}'), \quad (1.16)$$

$l = 1, m = -1$ では

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

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

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

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對し、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 $O_l^{m*}(\mathbf{r})$ 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、

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

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

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

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

$l = 2, m = 1$ のとき

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

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

$l = 2, m = 0$ のとき

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

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

$l = 2, m = -1$ のとき

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

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

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

$l = 2, m = -2$ のとき、

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

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

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

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

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

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

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

$l = 3, m = 2$ のとき

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

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

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

$l = 3, m = 1$ のとき

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

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

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

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

$l = 3, m = 0$ のとき

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

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

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

$l = 3, m = -1$ のとき

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

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

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

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

$l = 3, m = -2$ のとき

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

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

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

$l = 3, m = -3$ のとき

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

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

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

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

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

の中身がわかった。

1.1.2 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

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = -\nabla \phi(\mathbf{r}) \quad (1.58)$$

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

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

$$(1.61)$$

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

$$\hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}} \quad (1.62)$$

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

であった。これを次のようにする。

$$-\frac{i}{r^2} \mathbf{r} \times \hat{\mathbf{L}} = \frac{1}{r} \left(\mathbf{e}_\theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \mathbf{e}_\varphi \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \quad (1.64)$$

これはまさに3次元極座標における勾配の θ, φ 成分である。よって電場は

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

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、

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

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

$$(1.68)$$

で定義される。^{*1}これを使うと電場は

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = - \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \sqrt{l+1} \frac{Q_l^m}{r^{l+2}} \mathbf{Z}_{lm}^{(l+1)}(\theta, \varphi) \quad (1.69)$$

$$= - \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \sqrt{4\pi(l+1)} \frac{Q_l^m}{r^{l+2}} \mathbf{Y}_{lm}^{(l+1)}(\theta, \varphi) \quad (1.70)$$

$$(1.71)$$

と書ける。

1.1.3 電気多極子のパリティ

電気多極子の定義は

$$Q_l^m = \int \mathbf{r} r^l Z_l^m(\theta, \varphi) \rho(\mathbf{r}) \quad (1.72)$$

であった。空間反転では $\theta \rightarrow \pi - \theta$, $\varphi \rightarrow \varphi \pm 2\pi$ としてやればよいので、空間反転に関するパリティは球面調和関数による $(-1)^l$ である。時間反転に関しては、電荷は時間反転に関して偶パリティであるため全体としても偶パリティである。

1.2 磁気多極子

1.2.1 ベクトルポテンシャル

磁場に関するガウスの法則

$$\nabla \cdot \mathbf{B}(\mathbf{r}) = 0 \quad (1.73)$$

より

$$\mathbf{B}(\mathbf{r}) = \nabla \times \mathbf{A}(\mathbf{r}) \quad (1.74)$$

となるベクトル関数 $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ がある。これをベクトルポテンシャルという。これを cgs-Gauss のアンペールの式に入れると

$$\nabla \times (\nabla \times \mathbf{A}(\mathbf{r})) = \frac{4\pi}{c} \mathbf{j}(\mathbf{r}) \quad (1.75)$$

$$\nabla(\nabla \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r})) - \nabla^2 \mathbf{A}(\mathbf{r}) = \frac{4\pi}{c} \mathbf{j}(\mathbf{r}) \quad (1.76)$$

$$\nabla^2 \mathbf{A}(\mathbf{r}) = -\frac{4\pi}{c} \mathbf{j}(\mathbf{r}) \quad (1.77)$$

最後はクーロンゲージ条件

$$\nabla \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}) = 0 \quad (1.78)$$

を用いた。これを多重極展開を用いた解は

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}) = \frac{1}{c} \int d\mathbf{r}' \frac{\rho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \quad (1.79)$$

$$= \frac{1}{c} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{1}{r^{l+1}} \int d\mathbf{r}' \mathbf{j}(\mathbf{r}') r'^l P_l(\cos \theta') \quad (1.80)$$

$$= \frac{1}{c} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{1}{r^{l+1}} Z_l^m(\theta, \varphi) \int d\mathbf{r}' \mathbf{j}(\mathbf{r}') r'^l Z_l^{m*}(\theta', \varphi') \quad (1.81)$$

$$= \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \frac{1}{c r^{l+1}} Z_l^m(\theta, \varphi) \int d\mathbf{r}' \mathbf{j}(\mathbf{r}') O_l^m(\mathbf{r}') \quad (1.82)$$

となる。このまま積分の中身を J_{lm} と定義するという案もあるが、どうやらベクトルポテンシャルのゲージ不変性で不都合が出るらしい [?]。総和の中は以下のように変形できる。

^{*1} 楠瀬先生は $Z_{lm}^{(l)}$ は使っておらず、勝手に定義したものなのであまり一般的ではないかもしれない。

目標:

変形していく。

ここで、以前やった

に注意すると ∇O_l^m は

と書けるので、第一項の中身は

$$= -(\mathbf{r} \times \mathbf{j}) \cdot (l\mathbf{r}Z_l^m) \quad (1.95)$$

1.3 電荷磁荷対応

これまでに3種類の多極子が現れたが、時間空間反転対称性の偶奇性から物性を整理することを考えると4種類の多極子があることが望ましい。では4種類目はどこから現れるかというと、電荷 ρ と電流 \mathbf{j} を磁荷 ρ_m と磁化電流密度 \mathbf{j}_m に置き換えたものを考えることで得られる。

まず初めに電気多極子モーメントの電荷密度を置き換えたものを見る。電荷と分極密度 \mathbf{P} の間には

$$\rho(\mathbf{r}) = -\nabla \cdot \mathbf{P}(\mathbf{r}) \quad (1.96)$$

という関係があるので、これとのアナロジーで磁荷と磁化密度 \mathbf{M} の間には

$$\rho_m(\mathbf{r}) = -\nabla \cdot \mathbf{M}(\mathbf{r}) \quad (1.97)$$

という関係が成り立っているとする。このとき、電気多極子モーメントの電荷を磁荷に置き換えたものを \tilde{Q}_l^m とすると

$$\tilde{Q}_l^m = \int d\mathbf{r} O_l^m(\mathbf{r}) \rho_m(\mathbf{r}) \quad (1.98)$$

$$= - \int d\mathbf{r} O_l^m(\mathbf{r}) \nabla \cdot \mathbf{M}(\mathbf{r}) \quad (1.99)$$

$$= \int d\mathbf{r} \mathbf{M}(\mathbf{r}) \cdot \nabla O_l^m(\mathbf{r}) \quad (1.100)$$

ここで、

$$\int d\mathbf{r} (\mathbf{r} O_l^m(\mathbf{r})) \cdot (\nabla \times \mathbf{j}(\mathbf{r})) = \int d\mathbf{r} \varepsilon_{ijk} x_i O_l^m(\mathbf{r}) \partial_j j_k(\mathbf{r}) \quad (1.101)$$

$$= \varepsilon_{ijk} \int d\mathbf{r} \partial_j \{ x_i O_l^m(\mathbf{r}) j_k(\mathbf{r}) \} - \int d\mathbf{r} \varepsilon_{ijk} \partial_j \{ x_i O_l^m(\mathbf{r}) \} j_k(\mathbf{r}) \quad (1.102)$$

$$= \int d\mathbf{r} \varepsilon_{ikj} x_i j_k(\mathbf{r}) (\partial_j O_l^m(\mathbf{r})) \quad (1.103)$$

$$= \int d\mathbf{r} (\mathbf{r} \times \mathbf{j}(\mathbf{r})) \cdot \nabla O_l^m(\mathbf{r}) \quad (1.104)$$

$$= \int d\mathbf{r} (\mathbf{r} \times (c \nabla \times \mathbf{M}(\mathbf{r}))) \cdot \nabla O_l^m(\mathbf{r}) \quad (1.105)$$

$$(1.106)$$