第 1 章

特殊関数

多極子を扱う上で球面調和関数は欠かせないものである。球面調和関数はルジャンドル多項式を一般化したものであるルジャンドル陪多項式と三角関数 $e^{im\varphi}$ からなる。まずはルジャンドル多項式から見ていこう。

参考文献

アルフケン特殊関数 [1], 砂川理論電磁気 [2], 前野量子力学 [3]

1.1 ルジャンドル多項式

1.1.1 ポアソン方程式

始めに電荷密度分布が与えられたとき、静電ポテンシャルを求める問題を考えよう。静電場において、電場は保存力であるため

$$\boldsymbol{\nabla} \times \boldsymbol{E}(\boldsymbol{r}) = 0 \tag{1.1}$$

をみたす。外微分のもつ性質 $\mathrm{dd}f = 0$ よりあるスカラー関数 $\phi(\boldsymbol{r})$ で

$$\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r}) = -\boldsymbol{\nabla}\phi(\boldsymbol{r}) \tag{1.2}$$

となるものがある。これを静電ポテンシャルという。これを電場についてのガウスの法則に入れると

$$\nabla^2\phi(\boldsymbol{r}) = -\frac{\rho(\boldsymbol{r})}{\varepsilon_0} \tag{1.3}$$

というのが得られる。これをポアソン方程式という。これの解はグリーン関数によって求められる。グリーン関数は次の微分方程式の解である。

$$\nabla^2 G(\boldsymbol{r}) = -\delta^3(\boldsymbol{r}) \tag{1.4}$$

これを求める。両辺をフーリエ変換すると

$$-\boldsymbol{k}^2 G(\boldsymbol{k}) = -\frac{1}{(2\pi^3)} \tag{1.5}$$

となる。これよりグリーン関数は

$$G(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{(2\pi^3)}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}}{\boldsymbol{k}^2}d^3k \tag{1.6}$$

となる。この積分を極座標で実行していく。原点と $\boldsymbol{r}$ の示す方向を極座標の軸としてすると

$$\begin{aligned}
G(\boldsymbol{r}) &= \frac{1}{(2\pi^3)}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}}{\boldsymbol{k}^2}d^3k \\
&= \frac{1}{2\pi^3}\int_0^{\infty}dk\int_0^{\pi}d\theta\sin\theta\frac{e^{ikx\cos\theta}}{k^2}\int_0^{2\pi}d\varphi \\
&= \frac{1}{(2\pi)^2}\int_0^{\infty}dk\frac{2i\sin(kx)}{ikx} \\
&= \frac{1}{4\pi}\frac{1}{|\boldsymbol{r}|}
\end{aligned}$$

となる。これよりポアソン方程式の特解は

$$\phi(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\int d\boldsymbol{r}\,\frac{\rho(\boldsymbol{r'})}{|\boldsymbol{r'}-\boldsymbol{r}|} \tag{1.7}$$

となる。極座標では $r > r'$ では

$$\frac{1}{|\boldsymbol{r'}-\boldsymbol{r}|} = \frac{1}{r}\frac{1}{\sqrt{1-2\cos\theta(r'/r)+(r'/r)^2}} \tag{1.8}$$

と書ける。

1.1.2 母関数

これはルジャンドル多項式の母関数となっている。それは

$$g(t,\,x) = \frac{1}{\sqrt{1-2xt+t^2}} = \sum_{n=0}^{\infty} P_n(x)t^n \tag{1.9}$$

というように書ける。[*1] この母関数を $g(r'/r,\,\cos\theta)$ としたものがポアソン方程式に現れている。母関数からその展開係数となっているルジャンドル多項式を導出する。テイラー展開より集束半径 $|x| \leq 1$ の元

$$(1+x)^\alpha = 1 + \alpha x + \frac{\alpha(\alpha-1)}{2!}x^2 + \cdots \frac{\alpha!}{n!(\alpha-n)!}x^n + \cdots = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{\alpha!}{n!(\alpha-n)!}x^n \tag{1.10}$$

と展開できる。これより

$$\begin{aligned}
\frac{1}{\sqrt{1-2xt+t^2}} &= \sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-1/2)!}{n!(-1/2-n)!}(-2xt+t^2)^n && (1.11)\\
&= 1 + \sum_{n=1}^{\infty}\frac{(-1/2)(-3/2)\cdots(-(2n-1)/2)}{n!}\times(-1)^n(2xt-t^2)^n && (1.12)\\
&= 1 + \sum_{n=1}^{\infty}\frac{(2n-1)!!}{2^n n!}(2xt-t^2)^n && (1.13)\\
&= \sum_{n=0}^{\infty}\frac{(2n)!}{2^{2n}(n!)^2}(2x-t)^n\times t^n && (1.14)\\
&= \sum_{n=0}^{\infty}\frac{(2n)!}{2^{2n}(n!)^2}\left\{\sum_{k=0}^{n}\frac{n!}{k!(n-k)}(2x)^{n-k}(-t)^k\right\}\times t^n && (1.15)\\
&= \sum_{n=0}^{\infty}\sum_{k=0}^{n}(-1)^k\frac{(2n)!}{2^{2n}n!k!(n-k)!}(2x)^{n-k}t^{n+k}. && (1.16)
\end{aligned}$$

ここで $n' = n+k$, というように変数変換をする。すると $0 \leq k \leq n'-k$ より

$$0 \leq k \leq \left\lfloor \frac{n'}{2} \right\rfloor \tag{1.17}$$

という範囲になる。よって

$$\frac{1}{\sqrt{1-2xt+t^2}} = \sum_{n=0}^{\infty}\sum_{k=0}^{\lfloor n/2\rfloor}(-1)^k\frac{(2n-2k)!}{2^{2(n-k)}k!(n-k)!(n-2k)!}(2x)^{n-2k}t^n \tag{1.18}$$

$$P_n(x) = \sum_{k=0}^{\lfloor n/2\rfloor}(-1)^k\frac{(2n-2k)!}{2^n k!(n-k)!(n-2k)!}x^{n-2k} \tag{1.19}$$

[*1] ゲーゲンバウアー関数 $g(t,\,x,\,\alpha) = (1-2xt+t^2)^{-\alpha} = \sum_n C_n^\alpha(x)t^n$ というのもある。

1.1.3 漸化式

ルジャンドル多項式は 1 つだけではなく組み合わせて使うことがある。ルジャンドル多項式を計算機で効率よく求める際には母関数から得られる漸化式を使うと良いことがある。母関数 $g(t,\,x)$ を t で偏微分すると

$$\frac{\partial g(t,\,x)}{\partial t}=\frac{x-t}{(1-2xt+t^2)^{3/2}}=\sum_{n=0}^{\infty}nP_n(x)t^{n-1} \tag{1.20}$$

$$(x-t)\sum_{n=0}^{\infty}P_n(x)t^n=(1-2xt+t^2)\sum_{n=0}^{\infty}nP_n(x)t^{n-1} \tag{1.21}$$

$$\tag{1.22}$$

この式の両辺の t の次数について整理する。

$$\begin{aligned}0&=(1-2xt+t^2)\sum_{n=0}^{\infty}nP_n(x)t^{n-1}+(t-x)\sum_{n=0}^{\infty}P_n(x)t^n && (1.23)\\ &=\sum_{m=0}^{\infty}mP_m(x)t^{m-1}-\sum_{n=0}^{\infty}(2n+1)xP_n(x)t^n+\sum_{s=0}^{\infty}(s+1)P_s(x)t^{s+1} && (1.24)\\ &=\underbrace{P_1(x)-xP_0(x)}_{=0}+\sum_{n=1}^{\infty}\Big\{(n+1)P_{n+1}(x)-(2n+1)xP_x(x)+nP_{n-1}(x)\Big\}t^n && (1.25)\end{aligned}$$

これより漸化式

$$\begin{aligned}P_{n+1}(x)&=\frac{2n+1}{n+1}xP_n(x)-\frac{n}{n+1}P_{n-1}(x) && (1.26)\\ &=2xP_n(x)-P_{n-1}-\frac{xP_n(x)-P_{n-1}}{n+1} && (1.27)\end{aligned}$$

が得られる。最後の行は丸め誤差を抑えた形である。

表 1.1: ルジャンドル多項式を $n=6$ まで求めたもの。

次数 n	ルジャンドル多項式 $P_n(x)$
$n=0$	$P_0(x)=1$
$n=1$	$P_1(x)=x$
$n=2$	$P_2(x)=\frac{1}{2}\big(3x^2-1\big)$
$n=3$	$P_3(x)=\frac{1}{2}\big(5x^2-3x\big)$
$n=4$	$P_4(x)=\frac{1}{8}\big(35x^4-30x^2+3\big)$
$n=5$	$P_5(x)=\frac{1}{8}\big(63x^4-70x^2+15x\big)$
$n=6$	$P_6(x)=\frac{1}{16}\big(231x^6-315x^4+105x^2-5\big)$

1.1.4 微分方程式

母関数 $g(t,\,x)$ を t で微分すると計算機で数値計算するときに便利な漸化式が得られた。x で偏微分すると何が得られるだろうか。それはルジャンドル多項式が解となる微分方程式である。正直ここは式をこねくりまわしているだけではあるので、この節は結果だけ飲み込んでおくというのもありではある。結果は節の最後らへんに記述している。

では x で偏微分していこう。

$$\frac{\partial g(t,\,x)}{\partial x}=\frac{t}{(1-2xt+t^2)^{3/2}}=\sum_{n=0}^{\infty}P_n'(x)t^n \tag{1.28}$$

$$t\sum_{n=0}^{\infty}P_n(x)t^n=(1-2xt+t^2)\sum_{n=0}^{\infty}P_n'(x)t^n \tag{1.29}$$

これを t の次数について整理する。

$$0=\sum_{n=0}^{\infty}P_n'(x)t^n-\sum_{n=0}^{\infty}\Big\{2xP_n'(x)+P_n(x)\Big\}t^{n+1}+\sum_{n=0}^{\infty}P_n'(x)t^{n+2} \tag{1.30}$$

$$=\underbrace{P_0'(x)}_{=0}+\underbrace{\Big\{P_1'(x)-2xP_0'(x)-P_0(x)\Big\}}_{=0}t+\sum_{n=0}^{\infty}\Big\{P_{n-2}'(x)-2xP_{n-1}'(x)-P_{n-1}(x)+P_n'(x)\Big\}t^{n+2}. \tag{1.31}$$

これより

$$P_{n+1}'(x)+P_{n-1}'(x)=2xP_n'(x)+P_n(x) \tag{1.32}$$

次数が違うルジャンドル多項式が混じっているのでこれを整理していこう。(1.26) 式より

$$P_{n+1}'(x)=\frac{2n+1}{n+1}P_n(x)+\frac{2n+1}{n+1}xP_n'(x)-\frac{n}{n+1}P_{n-1}'(x) \tag{1.33}$$

この 2 式を組み合わせて $P_n'(x)$ を消去すると

$$P_{n+1}'(x)-P_{n-1}'(x)=(2n+1)P_n(x) \tag{1.34}$$

(1.32) 式と (1.34) 式を組み合わせることで二項間漸化式

$$P_{n+1}'(x)=(n+1)P_n(x)+xP_n(x) \tag{1.35}$$

$$P_{n-1}'(x)=-nP_n(x)+xP_n'(x) \tag{1.36}$$

が得られる。(1.35) 式の n を $n-1$ にしたものと、(1.36) 式に x をかけたものを組み合わせると

$$(1-x^2)P_n'(x)=nP_{n-1}(x)-nxP_n(x) \tag{1.37}$$

が得られる。そしてこの式の両辺を x で微分したものと (1.36) 式に n をかけたものを組み合わせると

$$(1-x^2)P_n''(x)-2xP_n'(x)+n(n+1)P_n(x)=0 \tag{1.38}$$

という微分方程式が出てくる。この節を飛ばそうとしていた方はこの式と次の式を抑えておこう。

もともと考えていたポアソン方程式では $x=\cos\theta$ のことであったのでこれで書き直すと

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\theta}\left(\sin\theta\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\theta}P_n(\cos\theta)\right)+n(n+1)P_n(\cos\theta)=0 \tag{1.39}$$

となる。この式は球面調和関数のところでまた出会うだろう。また、この式は固有値方程式

$$-\frac{1}{\sin\theta}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\theta}\left(\sin\theta\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\theta}P_n(\cos\theta)\right)=n(n+1)P_n(\cos\theta)=0 \tag{1.40}$$

とみなせる。つまり、左のような微分演算子がかかったときの固有値は 0 以上の整数 n を用いて $n(n+1)$ という形になる。

1.1.5 ルジャンドル多項式のパリティ

ポアソン方程式の解の空間反転のパリティを見たい時がある。そのためルジャンドル多項式の空間反転に対するパリティを確認する。ルジャンドル多項式の母関数は

$$g(t,\,x)=\frac{1}{\sqrt{1-2xt+t^2}}=\sum_{n=0}^{\infty}P_n(x)t^n \tag{1.41}$$

これをみると $g(t,\,-x)=g(-t,\,x)$ とわかるので

$$\sum_{n=0}^{\infty}P_n(-x)t^n=\sum_{n=0}^{\infty}(-1)^nP_n(x)t^n \tag{1.42}$$

$$P_n(-x)=(-1)^nP_n(x). \tag{1.43}$$

ルジャンドル多項式のパリティがわかった。

1.1.6 ロドリゲスの公式

ルジャンドル多項式はこのように変換できる

$$P_n(x) = \sum_{k=0}^{\lfloor n/2 \rfloor} (-1)^k \frac{(2n-2k)!}{2^n k!(n-k)!(n-2k)!} x^{n-2k} \tag{1.44}$$

$$= \frac{1}{2^n n!} \sum_{k=0}^{\lfloor n/2 \rfloor} (-1)^k \frac{n!}{k!(n-k)!} \left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)^n x^{2n-2k} \tag{1.45}$$

$$= \frac{1}{2^n n!} \left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)^n \sum_{k=0}^{\lfloor n/2 \rfloor} \frac{n!}{k!(n-k)!} (x^2)^{n-k} (-1)^k \tag{1.46}$$

ここで $\lfloor n/2 \rfloor + 1 \leq k \leq k$ では

$$\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)^n x^{2n-2k} = 0 \tag{1.47}$$

となることに注意すると和の範囲を広げることができて、

$$P_n(x) = \frac{1}{2^n n!} \left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)^n \sum_{k=0}^{n} \frac{n!}{k!(n-k)!} (x^2)^{n-k} (-1)^k \tag{1.48}$$

$$= \frac{1}{2^n n!} \left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)^n (x^2-1)^n \tag{1.49}$$

とできる。これをロドリゲスの公式という。

1.1.7 直交性

ルジャンドル多項式は $[-1,1]$ 区間を定義域に持つ関数に関して正規直交基底をなすという性質がある。これを使った数値積分のアルゴリズムがある等ルジャンドル多項式の良い性質の 1 つとなっている。この性質を完全に証明することはしないが、

$$\int_{-1}^{1} P_m(x) P_n(x) dx = \frac{2}{2n+1} \delta_{mn} \tag{1.50}$$

という直交性と、ルジャンドル多項式を基底としたときの関数は

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{2n+1}{2} a_n P_n(x) \tag{1.51}$$

$$a_n = \int_{-1}^{1} f(t) P_n(t) dt \tag{1.52}$$

と展開できることを示す。

$m \leq n$ としても一般性を失わない。ロドリゲスの公式を代入して部分積分を繰り返していく。

$$\int_{-1}^{1} P_m(x) \frac{1}{2^n n!} \left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)^n (x^2-1)^n dx$$

$$= \frac{1}{2^n n!} \left(\underbrace{\left[P_n(x) \frac{\mathrm{d}^{n-1}}{\mathrm{d}x^{n-1}} \left(x^2-1\right)^{n-1} \right]_{-1}^{1}}_{=0} - \int_{-1}^{1} P'_m(x) \frac{\mathrm{d}^{n-1}}{\mathrm{d}x^{n-1}} \left(x^2-1\right)^n dx \right) \tag{1.53}$$

$$= -\frac{1}{2^n n!} \int_{-1}^{1} P'_m(x) \frac{\mathrm{d}^{n-1}}{\mathrm{d}x^{n-1}} \left(x^2-1\right)^n dx \tag{1.54}$$

$$= \frac{(-1)^n}{2^n n!} \int_{-1}^{1} P_m^{(n)}(x) (1-x^2)^n dx \tag{1.55}$$

$P_m(x)$ は m 次の多項式である。そのため $m < n$ のときには $P_m^{(n)}(x) = 0$ である。$m = n$ のときにはルジャンドル多項式の級数表示により

$$P_n^{(n)}(x) = \frac{(2n)!}{2^n (n!)^2} \times n! = \frac{(2n)!}{2^n n!} \tag{1.56}$$

となる。よって

$$\int_{-1}^{1} P_m(x)P_n(x)dx = \frac{\delta_{mn}(2n)!}{(2n)!!}\int_{-1}^{1}(1-x^2)^n dx \tag{1.57}$$

後の積分を求める。$x = \sin\theta$ と変数変換してウォリスの公式を使うと

$$\int_{-1}^{1}(1-x^2)^n dx = \int_{-\pi}^{\pi}\cos^{2n+1}\theta d\theta = 2\times\frac{(2n)!!}{(2n+1)!!} = 2\times\frac{(2n)!!}{(2n+1)!}. \tag{1.58}$$

以上より

$$\int_{-1}^{1} P_m(x)P_n(x)dx = \frac{2}{2n+1}\delta_{mn} \tag{1.59}$$

という直交性を示せた。

ルジャンドル多項式式で関数 $f(x)$ が

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n P_n(x) \tag{1.60}$$

と展開できたとする。ルジャンドル多項式の直交性により

$$\int_{-1}^{1} f(x)P_m(x) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \int_{-1}^{1} P_n(x)P_m(x) \tag{1.61}$$

$$= \frac{2a_m}{2m+1} \tag{1.62}$$

となるので定義域が $[-1,\, 1]$ の関数 $f(x)$ は

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{2n+1}{2}a_n P_n(x) \tag{1.63}$$

$$a_n = \int_{-1}^{1} f(t)P_n(t)dt \tag{1.64}$$

というように展開できる。

1.2 球面調和関数

ポアソン方程式の解としてグリーン関数経由でルジャンドル多項式の存在を確かめた。ではそんな回りくどいことをせず直接微分方程式を解くことで得られないかを考えてみよう。

まず初めに 3 次元極座標のラプラシアンの導出をしよう。微分幾何によるとラプラシアンは空間の計量テンソルを g_{ij} として

$$\nabla^2 = \frac{1}{\sqrt{\det g_{ij}}}\partial_i\sqrt{\det g_{ij}}\partial^i \tag{1.65}$$

となる。3 次元極座標では

$$g_{ij} = \mathrm{diag}(1,\, r^2,\, r^2\sin^2\theta) \tag{1.66}$$

よりラプラシアンは

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2\sin\theta}\left\{\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\sin\theta\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{\partial}{\partial\theta}\left(r^2\sin\theta\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{\partial}{\partial\varphi}\left(r^2\sin\theta\frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)\right\} \tag{1.67}$$

$$= \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} \tag{1.68}$$

となる。これよりポアソン方程式は次のように書ける。

$$\left[\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]\phi(r,\,\theta,\,\varphi) = -\frac{\rho(\boldsymbol{r})}{\varepsilon_0} \tag{1.69}$$

一般解を求めることを考えるため $\rho(\boldsymbol{r}) = 0$ とする。この偏微分方程式は

$$\phi(r,\,\theta,\,\varphi) = \frac{R(r)}{r}Y(\theta,\,\varphi) \tag{1.70}$$

というように変数分離できる。これらの元ポアソン方程式に入れていって整理すると

$$\frac{r}{R(r)}\frac{\mathrm{d}^2R(r)}{\mathrm{d}r^2}=-\frac{1}{Y(\theta,\,\varphi)}\left\{+\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right\}Y(\theta,\,\varphi) \tag{1.71}$$

右辺と左辺の関数の引数は独立なのでこの等号が成り立つためには定数でなければならない。よって

$$\lambda_1=-\frac{r}{R(r)}\frac{\mathrm{d}^2R(r)}{\mathrm{d}r^2} \tag{1.72}$$

$$\lambda_1=\frac{1}{Y(\theta,\,\varphi)}\left\{\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right\}Y(\theta,\,\varphi) \tag{1.73}$$

というよう動径方向と角度方向に分けることができた。

次に角度方向だけに注目しよう。同じように

$$Y(\theta,\,\varphi)=\Theta(\theta)\Phi(\varphi) \tag{1.74}$$

というように変数分離して整理すると

$$\frac{\sin\theta}{\Theta}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\theta}\left(\sin\theta\frac{\mathrm{d}\Theta}{\mathrm{d}\theta}\right)+\lambda_1\sin^2\theta=-\frac{1}{\Phi}\frac{\mathrm{d}^2\Phi}{\mathrm{d}\phi^2} \tag{1.75}$$

またこの等式が成り立つことから分離定数を λ_2 とおいて整理すると

$$\frac{\mathrm{d}^2\Phi}{\mathrm{d}\varphi^2}+\lambda_2\Phi=0 \tag{1.76}$$

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\Theta}{\partial\theta}\right)+\left(\lambda_1-\frac{\lambda_2}{\sin^2\theta}\right)\Theta=0 \tag{1.77}$$

方位角については解は

$$\Phi=e^{i\sqrt{\lambda_2}\varphi},\ e^{-i\sqrt{\lambda_2}\varphi} \tag{1.78}$$

となる。これは減衰する解ではなく周期解になっている。また関数の一価性により $\sqrt{\lambda_2}$ は整数である必要があることがわかる。そこで改めて $m^2=\lambda_2$ とおく。またこれは

$$\int_0^{2\pi}(e^{im_1\varphi})^*e^{im_2\varphi}d\varphi=2\pi\delta_{m_1m_2} \tag{1.79}$$

というように直交している。規格直交にしたいので方位角方向の解は

$$\Phi_m=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\varphi} \tag{1.80}$$

というようにおく。

天頂角についての方程式を考える。方位角での結果を使うと

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\Theta}{\partial\theta}\right)+\left(\lambda_1-\frac{m^2}{\sin^2\theta}\right)\Theta=0 \tag{1.81}$$

この式は $m=0$ としてやれば

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\sin\theta\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\theta}P_n(\cos\theta)\right)+n(n+1)P_n(\cos\theta)=0 \tag{1.39 再掲}$$

と同じ形になっている。これより $\lambda_1=l(l+1),\ (l\geq 0)$ というように置きなおすとよいことがわかる。この l を軌道量子数という。$m=0$ ということは、解に方位角の依存性を落としたものに相当している。なのでルジャンドル多項式はポアソン方程式の一般解の一部にはなっていることがわかる。ということはルジャンドル多項式は拡張できることが示唆される。そうして拡張されたルジャンドル多項式をルジャンドル陪多項式という。

1.2.1 ルジャンドル陪多項式と角運動量代数

ルジャンドル多項式からルジャンドル陪多項式へと拡張する際、微分方程式を解くというアプローチがあるが、これは何をやっているかわからなくなりがちである。

そこで量子力学の手助けを借りよう。量子力学の角運動量における代数的な操作により、(1.81) 式の解の持つ性質やその関数形がわかる。今考えている微分方程式は量子力学の言葉で言うと、角運動量の 2 乗の大きさの演算子 $\hat{\boldsymbol{L}}^2$ に関する固有値方程式になっている。実際、角運動量は

$$
\begin{aligned}
\hat{\boldsymbol{L}} &= \hat{\boldsymbol{r}} \times \hat{\boldsymbol{p}} && (1.82)\\
&= r\boldsymbol{e}_r \times (-i\nabla) && (1.83)\\
&= -i\left(\boldsymbol{e}_\varphi \frac{\partial}{\partial\theta} - \boldsymbol{e}_\theta \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) && (1.84)
\end{aligned}
$$

であり[*2]、基底の微分も考慮しなければならないことを注意しながら次の量を計算すると

$$
\begin{aligned}
\hat{\boldsymbol{L}}^2 &= -\left(\boldsymbol{e}_\varphi \frac{\partial}{\partial\theta} - \boldsymbol{e}_\theta \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) \cdot \left(\boldsymbol{e}_\varphi \frac{\partial}{\partial\theta} - \boldsymbol{e}_\theta \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) && (1.85)\\
&= -\left\{\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right\} && (1.86)
\end{aligned}
$$

というように 3 次元ラプラシアンの角度成分が得られる。これを使うと角度方向の微分方程式は

$$
\hat{\boldsymbol{L}}^2 Y(\theta,\, \varphi) = l(l+1)Y(\theta,\, \varphi) \tag{1.87}
$$

という $l(l+1)$ の固有値を持った固有値方程式だとみなせる。固有値 $l(l+1),\, m$ を持った固有状態を

$$
Y_l^m(\theta,\, \varphi) = \Theta_l^m(\theta)\Phi_m(\varphi) \tag{1.88}
$$

というように書く。そしてこれは

$$
\int d\Omega,\, Y_l^{m*}(\theta,\, \varphi) Y_l^m(\theta,\, \varphi) = 1 \tag{1.89}
$$

というように規格化されているものとする。

なのでいったんルジャンドル陪多項式とは何だろうかという疑問からはいったん離れて角運動量演算子の代数的性質を見ていく。

角運動量の各成分を計算するには $\hat{\boldsymbol{L}}$ と $\boldsymbol{e}_x,\, \boldsymbol{e}_y,\, \boldsymbol{e}_z$ の内積をとればよい。すると

$$
\begin{aligned}
\hat{L}_x &= -i(\sin\theta\cos\varphi\boldsymbol{e}_r + \cos\theta\cos\varphi\boldsymbol{e}_\theta - \sin\theta\boldsymbol{e}_\varphi) \cdot \left(\boldsymbol{e}_\varphi \frac{\partial}{\partial\theta} - \boldsymbol{e}_\theta \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)\\
&= i\left(\cot\theta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi} + \sin\varphi\frac{\partial}{\partial\theta}\right) && (1.90)\\
\hat{L}_y &= -i(\sin\theta\sin\varphi\boldsymbol{e}_r + \cos\theta\sin\varphi\boldsymbol{e}_\theta + \cos\theta\boldsymbol{e}_\varphi) \cdot \left(\boldsymbol{e}_\varphi \frac{\partial}{\partial\theta} - \boldsymbol{e}_\theta \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)\\
&= i\left(\cot\theta\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi} - \cos\varphi\frac{\partial}{\partial\theta}\right) && (1.91)\\
\hat{L}_z &= -i(\cos\theta\boldsymbol{e}_r - \sin\theta\boldsymbol{e}_\theta) \cdot \left(\boldsymbol{e}_\varphi \frac{\partial}{\partial\theta} - \boldsymbol{e}_\theta \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)\\
&= -i\frac{\partial}{\partial\varphi} && (1.92)
\end{aligned}
$$

となる。これより Φ_m というのは $\hat{\boldsymbol{L}}_z$ 角運動量の z 成分の演算子の固有値 m の固有状態になっていることがわかる。角運動量の z 成分は磁場との相互作用をし、その大きさは分離定数 m に比例するものから、m を磁気量子数という。これらの演算子は次の交換関係を満たす

$$
\begin{aligned}
\left[\hat{\boldsymbol{L}}_i,\, \hat{\boldsymbol{L}}_i\right] &= i\epsilon_{ijk}\hat{\boldsymbol{L}}_k && (1.93)\\
\left[\hat{\boldsymbol{L}}^2\, \hat{\boldsymbol{L}}_i\right] &= 0. && (1.94)
\end{aligned}
$$

[*2] $\hbar = 1$ としている

唐突だか、この角運動量演算子を組み合わせて次の演算子を新に定義する。

$$\hat{L}_+ = \hat{L}_x + i\hat{L}_y = e^{i\varphi}\left(\frac{\partial}{\partial\theta} + i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) \tag{1.95}$$

$$\hat{L}_- = \hat{L}_x - i\hat{L}_y = e^{-i\varphi}\left(-\frac{\partial}{\partial\theta} + i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) \tag{1.96}$$

この後に使うのでこの演算子の持つ性質を調べていこう。これらの演算子はエルミート共役をとるともう一方の演算子となる。演算子 $\hat{A}$ のエルミート共役とは

$$\int dx\Big(\hat{A}g(x)\Big)f(x) = \int dx g^*(x)\hat{A}^\dagger f(x) \tag{1.97}$$

という関係が成り立つような演算子 $\hat{A}^\dagger$ のことである。また

$$\begin{aligned}\hat{L}_-\hat{L}_+ &= \Big(\hat{L}_x - i\hat{L}_y\Big)\Big(\hat{L}_x + i\hat{L}_y\Big) &(1.98)\\ &= \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2 - \hat{L}_z^2 + i\Big[\hat{L}_x,\, \hat{L}_y\Big] &(1.99)\\ &= \hat{\boldsymbol{L}}^2 - \hat{L}_z^2 - \hat{L}_z &(1.100)\end{aligned}$$

という関係も成り立っていることがわかる。

このこの演算子と $\hat{L}_z$ との交換関係を調べてみると

$$\Big[\hat{L}_z,\, \hat{L}_\pm\Big] = \pm\hat{L}_\pm \tag{1.101}$$

というのが成り立っている。[*3] これを使ってやると次のような変形ができる。

$$\begin{aligned}\hat{L}_z\hat{L}_+\Phi_m &= \Big(\hat{L}_+\hat{L}_z + \hat{L}_+\Big)\Phi_m &(1.102)\\ &= (m+1)\hat{L}_+\Phi_m. &(1.103)\end{aligned}$$

この式は何を意味しているかというと

$$\hat{L}_+\Phi_m = a\Phi_{m+1} \tag{1.104}$$

というように $\hat{L}_+$ は磁気量子数を 1 つ増やす演算子になっていることである (a は比例定数)。同様に $\hat{L}_-$ ついても計算していくと

$$\hat{L}_- e^{im\varphi} = be^{i(m-1)\varphi}. \tag{1.105}$$

これより $\hat{L}_-$ は磁気量子数を 1 つ減らす演算子とわかる。なので $\hat{L}_+,\, \hat{L}_-$ という演算子を昇降演算子と呼ぶ。

では比例定数を求めてみよう。

$$\begin{aligned}\int d\Omega\Big(\hat{L}_+Y_l^m(\theta,\,\varphi)\Big)^*\Big(\hat{L}_+Y_l^m(\theta,\,\varphi)\Big) &= \int d\Omega\, Y_l^{m*}(\theta,\,\varphi)\hat{L}_-\hat{L}_+Y_l^m(\theta,\,\varphi) &(1.106)\\ |a|^2 &= \int d\Omega\, Y_l^{m*}(\theta,\,\varphi)\Big(\hat{\boldsymbol{L}}^2 - \hat{L}_z^2 - \hat{L}_z\Big)Y_l^m(\theta,\,\varphi) &(1.107)\\ &= (l-m)(l+m+1) &(1.108)\end{aligned}$$

となるので

$$a = \sqrt{(l-m)(l+m+1)} \tag{1.109}$$

$$\hat{L}_+Y_l^m(\theta,\,\varphi) = \sqrt{(l-m)(l+m+1)}Y_l^{m+1}(\theta,\,\varphi) \tag{1.110}$$

となる。これより $m \leq l$ がわかる。また同様に考えていくと

$$b = \sqrt{(l+m)(l-m+1)} \tag{1.111}$$

$$\hat{L}_-Y_l^m(\theta,\,\varphi) = \sqrt{(l+m)(l-m+1)}Y_{\lambda_1}^{m-1}(\theta,\,\varphi) \tag{1.112}$$

となる。これより $-l \leq m$ がわかる。2 つの結果をまとめると $-l \leq m \leq m$ というのが m のとる条件である。これで量子力学パートは終了だ。

[*3] これは微分演算子の交換関係を直接用いるのではなく、$[\hat{L}_i,\, \hat{L}_j] = \varepsilon_{ijk}\hat{L}_k$ を使って計算するとよい。

1.2.2 球面調和関数と昇降演算子

もとの解きたい微分方程式は

$$\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\left(l(l+1)-\frac{m^2}{\sin^2\theta}\right)\right]\Theta^m_{\lambda_1}=0 \tag{1.81 再掲}$$

であった。このとき $m=0$ としたときの解がルジャンドル多項式と同じであった。規格化定数を a とすると

$$\Theta^0_l(\theta)=aP_l(\cos\theta) \tag{1.113}$$

である。規格化定数は

$$\begin{aligned}1&=\int_0^\theta\Big\{aP_l(\cos\theta)\Big\}^*\Big\{aP_1(\cos\theta)\Big\}\sin\theta d\theta &(1.114)\\ &=|a|^2\int_{-1}^1 P_l^2(x)dx &(1.115)\\ &=|a|^2\frac{2}{2l+1} &(1.116)\end{aligned}$$

より

$$\begin{aligned}a&=\sqrt{\frac{2l+1}{2}} &(1.117)\\ \Theta^0_l(\theta)&=\sqrt{\frac{2l+1}{2}}P_l(\cos\theta) &(1.118)\end{aligned}$$

となる。なので

$$Y^0_l(\theta,\,\varphi)=\sqrt{\frac{2l+1}{2}}P_l(\cos\theta)\times\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{i0\varphi} \tag{1.119}$$

0 だった磁気量子数を上昇演算子に作用させていこう。

$$\begin{aligned}Y^1_l(\theta,\varphi)&=\frac{1}{\sqrt{(l-0)(l+0+1)}}\left\{e^{i\varphi}\left(\frac{\partial}{\partial\theta}+i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)\right\}\sqrt{\frac{2l+1}{2}}P_l(\cos\theta)\times\frac{1}{\sqrt{2\pi}} &(1.120)\\ &=\frac{1}{\sqrt{l(l+1)}}\sqrt{\frac{2l+1}{2}}\frac{\partial}{\partial\theta}P_l(\cos\theta)\times\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{i\phi} &(1.121)\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}Y^2_l(\theta,\varphi)&=\frac{1}{\sqrt{(l-1)(l+1+1)}}\left\{e^{i\varphi}\left(\frac{\partial}{\partial\theta}+i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)\right\}\frac{1}{\sqrt{l(l+1)}}\sqrt{\frac{2l+1}{2}}\frac{\partial}{\partial\theta}P_l(\cos\theta)\times\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{i\phi} &(1.122)\\ &=\frac{1}{\sqrt{l(l-1)(l+1)(l+2)}}\sqrt{\frac{2l+1}{2}}\left(\frac{\partial}{\partial\theta}-\cot\theta\right)\frac{\partial}{\partial\theta}P_l(\cos\theta)\times\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{2i\phi} &(1.123)\end{aligned}$$

$$Y^3_l(\theta,\,\varphi)=\sqrt{\frac{l!}{(l+3)!}\frac{(l-3)!}{l!}}\sqrt{\frac{2l+1}{2}}\left(\frac{\partial}{\partial\theta}-2\cot\theta\right)\left(\frac{\partial}{\partial\theta}-\cot\theta\right)\frac{\partial}{\partial\theta}P_l(\cos\theta)\times\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{3i\phi} \tag{1.124}$$

$$\begin{aligned}Y^m_l(\theta,\,\varphi)&=\sqrt{\frac{l!}{(l+m)!}\frac{(l-m)!}{l!}}\sqrt{\frac{2l+1}{2}}\prod_{k=0}^{m-1}\left(\frac{\partial}{\partial\theta}-k\cot\theta\right)P_l(\cos\theta)\times\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\varphi} &(1.125)\\ &=\sqrt{\frac{2l+1}{2}\frac{(l-m)!}{(l+m)!}}\prod_{k=0}^{m-1}\left\{\sin^k\theta\left(\frac{\partial}{\partial\theta}\frac{1}{\sin^k\theta}\right)\right\}P_l(\cos\theta)\times\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\varphi} &(1.126)\\ &=\sqrt{\frac{2l+1}{2}\frac{(l-m)!}{(l+m)!}}\prod_{k=0}^{m-1}\left\{-\sin^{k+1}\theta\left(\frac{\partial}{\partial(\cos\theta)}\frac{1}{\sin^k\theta}\right)\right\}P_l(\cos\theta)\times\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\varphi} &(1.127)\\ &=(-1)^m\sqrt{\frac{2l+1}{2}\frac{(l-m)!}{(l+m)!}}\sin^m\theta\frac{\partial^m P_l(\cos\theta)}{\partial(\cos\theta)^m}\times\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\varphi} &(1.128)\end{aligned}$$

となる。また同様に $P_l(\cos\theta)$ に下降演算子を作用させていこう。

$$Y_l^{-1}(\theta,\varphi)=\frac{1}{\sqrt{(l+0)(l-0+1)}}\left\{e^{-i\varphi}\left(-\frac{\partial}{\partial\theta}+i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)\right\}\sqrt{\frac{2l+1}{2}}P_l(\cos\theta)\times\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \tag{1.129}$$

$$=-\frac{1}{\sqrt{l(l+1)}}\sqrt{\frac{2l+1}{2}}\frac{\partial}{\partial\theta}P_l(\cos\theta)\times\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{-i\phi} \tag{1.130}$$

$$Y_l^{-2}(\theta,\varphi)=-\frac{1}{\sqrt{(l+2)(l-2+1)}}\left\{e^{-i\varphi}\left(-\frac{\partial}{\partial\theta}+i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)\right\}\sqrt{l(l+1)}\sqrt{\frac{2l+1}{2}}\frac{\partial}{\partial\theta}P_l(\cos\theta)\times\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{-i\phi} \tag{1.131}$$

$$=\frac{1}{\sqrt{l(l-1)(l+1)(l+2)}}\sqrt{\frac{2l+1}{2}}\left(\frac{\partial}{\partial\theta}-\cot\theta\right)\frac{\partial}{\partial\theta}P_l(\cos\theta)\times\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{-2i\phi} \tag{1.132}$$

$$Y_l^{-3}(\theta,\,\varphi)=-\sqrt{\frac{l!}{(l+3)!}\frac{(l-3)!}{l!}}\sqrt{\frac{2l+1}{2}}\left(\frac{\partial}{\partial\theta}-2\cot\theta\right)\left(\frac{\partial}{\partial\theta}-\cot\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)\frac{\partial}{\partial\theta}P_l(\cos\theta)\times\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{-3i\phi} \tag{1.133}$$

$$Y_l^{-m}(\theta,\,\varphi)=(-1)^m\sqrt{\frac{l!}{(l+m)!}\frac{(l-m)!}{l!}}\sqrt{\frac{2l+1}{2}}\prod_{k=0}^{k-1}\left(\frac{\partial}{\partial\theta}-k\cot\theta\right)P_l(\cos\theta)\times\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{-im\varphi} \tag{1.134}$$

$$=(-1)^m\sqrt{\frac{2l+1}{2}\frac{(l-m)!}{(l+m)!}}\prod_{k=0}^{m-1}\left\{\sin^k\theta\left(\frac{\partial}{\partial\theta}\frac{1}{\sin^k\theta}\right)\right\}P_l(\cos\theta)\times\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{-im\varphi} \tag{1.135}$$

$$=(-1)^m\sqrt{\frac{2l+1}{2}\frac{(l-m)!}{(l+m)!}}\prod_{k=0}^{m-1}\left\{-\sin^{k+1}\theta\left(\frac{\partial}{\partial(\cos\theta)}\frac{1}{\sin^k\theta}\right)\right\}P_l(\cos\theta)\times\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{-im\varphi} \tag{1.136}$$

$$=\sqrt{\frac{2l+1}{2}\frac{(l-m)!}{(l+m)!}}\sin^m\theta\frac{\partial^m P_l(\cos\theta)}{\partial(\cos\theta)^m}\times\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{-im\varphi} \tag{1.137}$$

となる。よって変数分離して得られた天頂角成分の固有関数は

$$\Theta_l^m(\theta)=(-1)^{\frac{m+|m|}{2}}\sqrt{\frac{2l+1}{2}\frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}}\sin^{|m|}\theta\frac{\partial^{|m|}P_l(\cos\theta)}{\partial(\cos\theta)^{|m|}} \tag{1.138}$$

となる。この式の形を決めている部分を $x=\cos\theta$ として

$$P_l^m(\cos\theta)=\sin^m\theta\frac{\partial^m P_l(\cos\theta)}{\partial(\cos\theta)^m} \tag{1.139}$$

$$P_l^m(x)=(1-x^2)^{m/2}\frac{\mathrm{d}^m P_l(x)}{\mathrm{d}x^m} \tag{1.140}$$

とやる。これがルジャンドル陪多項式である。m が負のとき、微分がよくわからなくなるように見える。これはロドリゲスの公式をつかってルジャンドル多項式を展開してあげると意味のある式になっていることがわかる。天頂角成分の解は

$$\Theta_l^m(\theta)=(-1)^{\frac{m+|m|}{2}}\sqrt{\frac{2l+1}{2}\frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}}P_l^m(\cos\theta) \tag{1.141}$$

となる。以上よりポアソン方程式の一般解のうち角度成分の関数形がわかった。それを書くと、

$$Y_l^m(\theta,\,\varphi)=(-1)^{\frac{m+|m|}{2}}\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}\frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}}P_l^m(\cos\theta)e^{im\varphi} \tag{1.142}$$

というようになる。これが球面調和関数と呼ばれるものである。

1.2.3 球面調和関数の関数形の覚え方・導出の仕方

多極子を扱う上で球面調和関数の形や関数形は覚えておくとよい。おそらく f 電子系までの多極子であるため $l=4$ まで覚えた方がよいのだろう。球面調和関数の形を覚える・導出するうえで便利な関係式をまとめる。

まず初めに、$m=l$ の状態を考える。これは上昇演算子を作用させたときに 0 となる関数であるので、

$$e^{i\varphi}\left(\frac{\partial}{\partial\theta}+i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)Y_l^l(\theta,\varphi)=0. \tag{1.143}$$

球面調和関数に ∂_φ を作用させると im が下りてくるので、

$$\left(\frac{\partial}{\partial\theta}-\cot\theta\right)Y_l^l(\theta,\,\varphi)=0 \tag{1.144}$$

$$\sin^l\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\frac{1}{\sin^l\theta}Y_l^l(\theta,\,\varphi)\right)=0 \tag{1.145}$$

これより

$$Y_l^l=a\sin^l\theta\,e^{il\varphi} \tag{1.146}$$

とわかる。規格化定数 a を求める。ちょっと考えると規格化の積分の式は次のようになる。

$$1=|a|^2\int_0^\pi d\theta\sin^{2l+1}\theta\int_0^{2\pi}d\varphi \tag{1.147}$$

$$=4\pi|a|^2\int_0^\pi\cos^{2l+1}\theta d\theta \tag{1.148}$$

$$a=\sqrt{\frac{1}{4\pi}\times\frac{(2l+1)(2l-1)\cdots3\cdot1}{2l(2l-2)\cdots4\cdot2}} \tag{1.149}$$

とわかる。最後の行へはウォリスの公式を使った。というようにして -1 の分の位相も考慮して

$$Y_l^l(\theta,\,\varphi)=(-1)^l\sqrt{\frac{1}{4\pi}\times\frac{(2l+1)(2l-1)\cdots3\cdot1}{2l(2l-2)\cdots4\cdot2}}\sin^l\theta\,e^{il\varphi} \tag{1.150}$$

だとわかる。また磁気量子数を $-m$ へとしたものは元の球面調和関数を見てやると

$$Y_l^{-m}(\theta,\,\varphi)=(-1)^lY_l^{m*}(\theta,\,\varphi)=\sqrt{\frac{2l}{4\pi}\frac{(l-m)!}{(l+m)!}}P_l^m(\cos\theta)e^{-im\varphi} \tag{1.151}$$

だとわかる。つまり方位角のところを $-m$ にして、天頂角はそのまま、規格化定数は $(-1)^m$ を無視してやればよい。

つぎに $m=l-1$ をやってみる。これは下降演算子を作用させればよい。下降演算子が効くところだけ抜き出すと

$$\frac{1}{\sqrt{(l+l)(l-l+1)}}e^{-i\varphi}\left(-\frac{\partial}{\partial\theta}-\cot\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)\sin^l\theta\,e^{il\varphi} \tag{1.152}$$

$$=\frac{-1}{\sqrt{2l}}\left(l\cos\theta\sin^{l-1}+l\frac{\cos\theta}{\sin\theta}\sin^l\theta\right)1e^{i(l-1)\varphi} \tag{1.153}$$

$$=-\sqrt{2l}\cos\theta\sin^{l-1}\theta\,e^{i(l-1)\varphi}. \tag{1.154}$$

つまり $\sin^l\theta\to(-\sqrt{2l}\cos\theta)\sin^{l-1}\theta$ というように、sin の l を 1 つ減らして、かわりに $-\sqrt{2l}\cos\theta$ を付け加えればよいことがわかる。よって

$$Y_l^{l-1}(\theta,\,\varphi)=(-1)^l\sqrt{\frac{1}{4\pi}\times\frac{(2l+1)(2l-1)\cdots3\cdot1}{2l(2l-2)\cdots4\cdot2}}\underline{\left(-\sqrt{2l}\cos\theta\right)\sin^{l-1}\theta}\,e^{i(l-1)\varphi} \tag{1.155}$$

さらに下げていこう。これまた下降演算子が効くところだけ抜き出して、

$$\frac{-\sqrt{2l}}{\sqrt{(l+(l-1))(l-(l-1)+1)}}e^{-i\varphi}\left(-\frac{\partial}{\partial\theta}+i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)\cos\theta\sin^{l-1}\theta,\,e^{i(l-1)\varphi}$$

$$=\frac{1}{\sqrt{2l-1}}\left\{\cos\theta\left(\frac{\partial}{\partial\theta}\sin^{l-1}\theta\right)-\sin^{l-1}\theta\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial(\cos\theta)}\cos\theta\right)+(l-1)\cot\theta\cos\theta\sin^{l-1}\theta\right\}e^{i(l-2)\varphi} \tag{1.156}$$

$$=\frac{1}{\sqrt{2l-1}}\sin^{l-2}\theta\left\{(2l-1)\cos^2\theta-1\right\}e^{i(l-2)\varphi} \tag{1.157}$$

つまり、$Y_l^l(\theta,\,\varphi)$ の結果を sin の l を 2 つ減らして、代わりに $\left\{(2l-1)\cos^2\theta-1\right\}/\sqrt{2l-1}$ を付け加えればよい。

$$Y_l^{l-2}(\theta,\,\varphi)=(-1)^l\sqrt{\frac{1}{4\pi}\times\frac{(2l+1)(2l-1)\cdots3\cdot1}{2l(2l-2)\cdots4\cdot2}}\underline{\frac{1}{\sqrt{2l-1}}\sin^{l-2}\theta\left\{(2l-1)\cos^2\theta-1\right\}}\,e^{i(l-2)\varphi} \tag{1.158}$$

そして $Y_l^0(\theta,\,\varphi)$ であるが、これはルジャンドル多項式の引数を $\cos\theta$ にしたものである。なのでルジャンドル多項式を $l=4$ まで覚えよう。規格化因子は方位角からくる $1/\sqrt{2\pi}$ とルジャンドル多項式の直交性からくる $\sqrt{(2l+1)/2}$ があるので

$$Y_l^0 = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}P_l(\cos\theta) \tag{1.159}$$

である。$Y_l^1(\theta,\,\varphi)$ はこれに上昇演算子を作用させるとよい。$m=0$ に注意すると

$$Y_l^1(\theta,\,\varphi) = -\frac{1}{\sqrt{l(l+1)}}\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}\sin\theta\frac{\partial P_l(\cos\theta)}{\partial(\cos\theta)}e^{i\varphi} \tag{1.160}$$

となる。これらの関係式とルジャンドル多項式を覚えれば $l=4$ まではその場で計算して導出できるだろう。

表 1.2: 球面調和関数の関数形を $0\leq l\leq 4$ まですべて書き下したもの。

球面調和関数 $Y_l^m(\theta,\,\varphi)$	
$Y_0^0(\theta,\,\varphi) = \dfrac{1}{\sqrt{4\pi}}$	
$Y_1^0(\theta,\,\varphi) = \sqrt{\dfrac{3}{4\pi}}\cos\theta$	$Y_1^{\pm1}(\theta,\,\varphi) = \mp\sqrt{\dfrac{3}{8\pi}}\sin\theta\,e^{\pm i\varphi}$
$Y_2^0(\theta,\,\varphi) = \sqrt{\dfrac{5}{16\pi}}\big(3\cos^2\theta-1\big)$	$Y_2^{\pm1}(\theta,\,\varphi) = \mp\sqrt{\dfrac{15}{8\pi}}\cos\theta\sin\theta\,e^{\pm i\varphi}$
$Y_2^{\pm2}(\theta,\,\varphi) = \sqrt{\dfrac{15}{32\pi}}\sin^2\theta\,e^{\pm2i\varphi}$	
$Y_3^0(\theta,\,\varphi) = \dfrac{1}{2}\sqrt{\dfrac{7}{4\pi}}(5\cos^3\theta-3\cos\theta)$	$Y_3^{\pm1}(\theta,\,\varphi) = \mp\sqrt{\dfrac{21}{64\pi}}\sin\theta(5\cos^2\theta-1)e^{\pm i\varphi}$
$Y_3^{\pm2}(\theta,\,\varphi) = \sqrt{\dfrac{105}{32\pi}}\sin^2\theta\cos\theta\,e^{\pm2i\varphi}$	$Y_3^{\pm3}(\theta,\,\varphi) = \mp\sqrt{\dfrac{35}{64\pi}}\sin^3\theta\,e^{\pm3i\varphi}$
$Y_4^0(\theta,\,\varphi) = \dfrac{1}{8}\sqrt{\dfrac{9}{4\pi}}(35\cos^4\theta-30\cos^2\theta+3)$	
$Y_4^{\pm1}(\theta,\,\varphi) = \mp\sqrt{\dfrac{45}{64\pi}}\sin\theta(7\cos^3\theta-3\cos\theta)e^{\pm2i\varphi}$	$Y_4^{\pm2}(\theta,\,\varphi) = \sqrt{\dfrac{45}{64\pi}}\sin^2\theta(7\cos^2\theta-1)e^{\pm2i\varphi}$
$Y_4^{\pm3}(\theta,\,\varphi) = \mp\sqrt{\dfrac{315}{64\pi}}\sin^3\theta\cos\theta\,e^{\pm3i\varphi}$	$Y_4^{\pm4}(\theta,\,\varphi) = \sqrt{\dfrac{315}{512\pi}}\sin^4\theta\,e^{\pm4i\varphi}$

1.2.4 ルジャンドル陪多項式と球面調和関数のパリティ

球面調和関数のパリティというのは物理的にも重要なものである。そのためパリティを調べていこう。まず初めにルジャンドル陪多項式をロドリゲスの公式を使って書くと

$$P_l^m(x) = (1-x^2)^{m/2}\frac{\mathrm{d}^m P_l(x)}{\mathrm{d}x^m} \tag{1.161}$$

これより

$$P_l^m(-x) = (-1)^{l+m}P_l^m(x) \tag{1.162}$$

だとわかる。

3 次元極座標において原点に関して反転させる操作は

$$(r,\,\theta,\,\varphi)\to(r,\,\pi-\theta,\,\varphi\pm\pi) \tag{1.163}$$

で与えれられる。これを使ってもルジャンドル陪多項式のパリティは

$$P_l^m(\cos(\pi-\theta)) = \sin^m(\pi-\theta)\frac{\partial^m}{\partial(\cos(\pi-\theta))^m}P_l(\cos(\pi-\theta)) \tag{1.164}$$

$$P_l^m(-\cos\theta) = (-1)^{l+m}\sin\theta\frac{\partial^m}{\partial(\cos\theta)^m}P_l(\cos\theta) = (-1)^{l+m}P_l^m(\cos\theta) \tag{1.165}$$

と示せる。また、球面調和関数のパリティは

$$Y_l^m(\pi-\theta,\,\varphi\pm\pi)=(-1)^{\frac{m+|m|}{2}}\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}\frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}}P_l^m(-\cos\theta)e^{im(\varphi\pm\pi)} \tag{1.166}$$

$$=(-1)^{l+2m}(-1)^{\frac{m+|m|}{2}}\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}\frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}}P_l^m(\cos\theta)e^{im\varphi} \tag{1.167}$$

$$=(-1)^lY_l^m(\theta,\,\varphi) \tag{1.168}$$

というようなパリティを持つ。

1.2.5 球面調和関数の直交性

球面調和関数は直交性を持っている。実際 $e^{im\varphi}$ の部分はフーリエ級数からもわかるように正規直交系をなしている。残るルジャンドル陪多項式の直交性を見ていこうルジャンドル陪多項式はルジャンドル多項式のロドリゲスの公式も組み合わせて書くと

$$P_l^m(x)=\frac{(1-x^2)^{m/2}}{2^l l!}\frac{\mathrm{d}^{l+m}}{\mathrm{d}x^{l+m}}\left(x^2-1\right)^l \tag{1.169}$$

である。$e^{im\varphi}$ の直交性により $P_l^m,\,P_{l'}^m$ の直交性だけ調べればよい。$l\le l'$ としても一般性を失わない。部分積分を繰り返して

$$\int_{-1}^1 P_{l'}^m(x)\left\{(1-x^2)^{m/2}\frac{\mathrm{d}^{l+m}}{\mathrm{d}x^{l+m}}\left(x^2-1\right)^l\right\}dx$$

$$=\frac{(-1)^{l+m}}{2^l l!}\int_{-1}^1\frac{\mathrm{d}^{l+m}}{\mathrm{d}x^{l+m}}\left\{(1-x^2)^{m/2}P_{l'}^m(x)\right\}\left(x^2-1\right)^l dx \tag{1.170}$$

$$\frac{(-1)^{l+m}}{2^l l!}\int_{-1}^1\frac{\mathrm{d}^{l+m}}{\mathrm{d}x^{l+m}}\left\{(1-x^2)^m\frac{\mathrm{d}^{l'+m}}{\mathrm{d}x^{l'+m}}\left(x^2-1\right)^l\right\}\left(x^2-1\right)^l dx \tag{1.171}$$

$$\frac{(-1)^{l+m}}{2^{l+l'}l!l'!}\sum_{k=0}^{l+m}\frac{(l+m)!}{k!(l+m-k)!}\int_{-1}^1\left(\frac{\mathrm{d}^{l+m-k}}{\mathrm{d}x^{l+m-k}}\left(1-x^2\right)^m\right)\left(\frac{\mathrm{d}^{l'+m+k}}{\mathrm{d}x^{l'+m+k}}\left(x^2-1\right)^l\right)(x^2-1)^l dx \tag{1.172}$$

微分の次数に注目すると

$$l+m-k\le 2m,\qquad l'+m+k\le 2l \tag{1.173}$$

これより総和で生き残る k は

$$l-m\le k\le 2l-l'-m \tag{1.174}$$

$l<l'$ ではそもそもこれは満たさない。これより $l=l'$ でなければ個の積分の値は残らないことがわかる。その積分の値は $k=l-m$ を入れて

$$\int_{-1}^1(P_l^m(x))^2dx=\frac{(-1)^{l+m}}{2^{2l}l!l!}\frac{(l+m)!}{(l-m)!(2m)!}\int_{-1}^1\left(\frac{\mathrm{d}^{2m}}{\mathrm{d}x^{2m}}\left(1-x^2\right)^m\right)\left(\frac{\mathrm{d}^{2l}}{\mathrm{d}x^{2l}}\left(x^2-1\right)^l\right)(x^2-1)^l dx \tag{1.175}$$

$$=\frac{(-1)^l}{2^{2l}l!l!}\frac{(l+m)!}{(l-m)!m!}(2l)!\int_{-1}^1(x^2-1)^l dx \tag{1.176}$$

$$=\frac{(-1)^l}{2^{2l}l!l!}\frac{(l+m)!}{l!m!}(2l)!\frac{(-1)^l 2^{2l+1}l!l!}{(2l+1)!} \tag{1.177}$$

$$=\frac{2}{2l+1}\frac{(l+m)!}{(l-m)!} \tag{1.178}$$

となる。よって

$$\int_0^\pi d\theta\sin\theta\int_0^{2\pi}Y_{l'}^{m'*}(\theta,\,\varphi)Y_l^m(\theta,\,\varphi)$$

$$=(-1)^{m+|m|}\sqrt{\frac{(2l+1)(2l'+1)}{(4\pi)^2}\frac{(l-|m|)!(l'-|m'|)!}{(l+|m|)!(l+|m'|)!}}\int_0^{2\pi}d\varphi e^{i(m-m')\varphi}\int_0^\pi d(\cos\theta)P_{l'}^{m'}(\cos\theta)P_l^m(\cos\theta) \tag{1.179}$$

$$=\delta_{m,\,m'}\delta_{l,\,l'} \tag{1.180}$$

となり直交性を示せた。

また、球面調和関数は完全系をなしているため任意の角度方向の関数は

$$f(\theta, \varphi) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=l}^{l} a_{lm} Y_l^m(\theta, \varphi) \tag{1.181}$$

$$a_{lm} = \int_0^{\pi} d\theta \sin\theta \int_0^{2\pi} d\varphi f(\theta, \varphi) Y_l^{m*}(\theta, \varphi) \tag{1.182}$$

というように展開できる。

1.2.6 球面調和関数の加法定理

もとのポアソン方程式を解くときの座標の取り方を思い出そう。このとき、極座標の軸は $\boldsymbol{r}$ の方向としていた。座標系の取り方に恣意性があるのはあまりよくはないと考えるのは物理である。なので座標系によらない表示を考える。

ある 3 次元極座標のもと 2 点 $(r_1, \theta_1, \varphi_1)$, $(r_2, \theta_2, \varphi_2)$ に電荷 q_1, q_2 があるとし、この二点の間の角度を γ とする。$r_1 > r_2$ のとき q_1 の感じる位置エネルギーはルジャンドル多項式による展開を用いて

$$\phi = \frac{q_1 q_2}{4\pi\varepsilon r_1} \sum_{l=0}^{\infty} P_l(\cos\gamma) \left(\frac{r_2}{r_1}\right)^l \tag{1.183}$$

というように書ける。この式が

$$\phi = \frac{q_1 q_2}{4\pi\varepsilon r_1} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{4\pi}{2l+1} \sum_{m=-l}^{l} Y_l^m(\theta_1, \varphi_1) Y_l^{m*}(\theta_2, \varphi_2) \left(\frac{r_2}{r_1}\right)^l \tag{1.184}$$

と書ける、つまり

$$P_l(\cos\gamma) = \frac{4\pi}{2l+1} \sum_{m=-l}^{l} Y_l^m(\theta_1, \varphi_1) Y_l^{m*}(\theta_2, \varphi_2) \tag{1.185}$$

が成り立つことを示すのがこの節の目標である。証明の過程でわかるが、球面調和関数についている $*$ はどちらの球面調和関数についてもよい。

いま

$$P_l(\cos\gamma) = \sum_{m=-l}^{l} A_{lm} Y_l^m(\theta_1, \varphi_1) \tag{1.186}$$

というように l 次のルジャンドル多項式であるため、l 次の球面調和関数で展開できるとする。球面調和関数の直交性より

$$A_{lm} = \int_0^{\pi} d\theta_1 \sin\theta_1 \int_0^{2\pi} d\varphi_1 Y_l^{m*}(\theta_1, \varphi_1) P_l(\cos\gamma). \tag{1.187}$$

$(r_2, \theta_2, \varphi_2)$ の点の方向を軸とした極座標系で e_1 の置かれた点の座標を書くと方位角は適当に ψ として (r_1, γ, ψ) とおける。すると球面調和関数 $Y_l^{m*}(\theta_1, \varphi_1)$ は

$$Y_l^{m*}(\theta_1, \varphi_1) = \sum_{m'=-l}^{l} a_{lm'} Y_l^{m'}(\gamma, \psi) \tag{1.188}$$

である。右辺を $\gamma = 0$ としたとき左辺の引数は (θ_2, φ_2) となっているはずなので

$$Y_l^{m*}(\theta_2, \varphi_2) = \sum_{m'=-l}^{l} a_{lm'} Y_l^{m'}(0, \psi) \tag{1.189}$$

である。$m' \neq 0$ の時には必ず $\sin\theta$ の項が入るので

$$Y_l^{m'}(0, \psi) = 0 \qquad (m' \neq 0) \tag{1.190}$$

$$Y_l^0(0, \psi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} \tag{1.191}$$

となる。これより

$$Y_l^{m*}(\theta_2,\,\varphi_2) = a_{l0}\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} \tag{1.192}$$

$$a_{l0} = \sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}}Y_l^{m*}(\theta_2,\,\varphi_2) \tag{1.193}$$

これを A_{lm} の展開係数の式に入れると $\theta_1,\,\varphi_1$ の引数が $\gamma,\,\psi$ に変換されていることに注意すると

$$A_{lm} = \int_0^\pi d\gamma\sin\gamma\int_0^{2\pi}d\psi P_l(\cos\gamma)\sum_{m'=-l}^{l}a_{lm'}Y_l^{m'}(\gamma,\,\psi) \tag{1.194}$$

$$= \sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}}a_{l0} \tag{1.195}$$

$$= \frac{4\pi}{2l+1}Y_l^{m*}(\theta_2,\,\varphi_2) \tag{1.196}$$

式変形の途中で球面調和関数の直交性を使った。以上より

$$P_l(\cos\gamma) = \frac{4\pi}{2l+1}\sum_{m=-l}^{l}Y_l^m(\theta_1,\,\varphi_1)Y_l^{m*}(\theta_2,\,\varphi_2) \tag{1.197}$$

というのが言えた。この式は多極子を考える際にはよく使うものである。すると因子 $4\pi/(2l+1)$ がうっとうしくなるので

$$Z_l^m(\theta,\,\varphi) := \sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}}Y_l^m(\theta,\,\varphi) = (-1)^{\frac{m+|m|}{2}}\sqrt{\frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}}P_l^m(\cos\theta)e^{im\varphi} \tag{1.198}$$

という Racah の規格化をとることが多い。

おまけに、この加法定理は実関数を用いて表すと

$$P_l(\cos\gamma) = P_l(\cos\theta_1)P_l(\cos\theta_2) + 2\sum_{m=1}^{l}\frac{(l-m)!}{(l+m)!}P_l^m(\cos\theta_1)P_l^m(\cos\theta_2)\cos m(\varphi_1-\varphi_2) \tag{1.199}$$

と書ける。

1.2.7 ルジャンドル陪多項式と球面調和関数の位相 (余談)

ルジャンドル陪多項式の位相の付け方については文献や数値計算ライブラリでの表記ゆれがとくにひどい。この (-1) の位相をルジャンドル陪多項式やもっと前のルジャンドル多項式に押し付けている文献もあれば、m の符号で球面調和関数の定義を分けるものもある。ルジャンドル陪多項式の m を負の符号で定義するかしないかもなのでルジャンドル多項式やルジャンドル陪多項式を数値計算で利用する際には、ライブラリの使用を確認しなければならない。ただ表記ゆれはあるが、球面調和関数の値自体は合うようにできている。ここで話が済めばよいのだが、ランダウは係数に i^l をさらに付け加えている。これを導入すると角運動量の合成の観点からもっとも自然であるそうだが、よくわからない。まったく、統一してほしいものだ。

第 2 章

多極子展開

2.1 電気多極子

2.1.1 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

$$\nabla^2\phi(\boldsymbol{r}) = -4\pi\rho(\boldsymbol{r}) \tag{2.1}$$

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

$$\begin{aligned}
\phi(\boldsymbol{r}) &= \int d\boldsymbol{r'}\frac{\rho(\boldsymbol{r'})}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r'}|} = \sum_{l=0}^{\infty}\frac{1}{r^{l+1}}\int d\boldsymbol{r'}\rho(\boldsymbol{r'}){r'}^{l}P_l(\cos\theta') && (2.2)\\
&= \sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{l}\frac{1}{r^{l+1}}\int d\boldsymbol{r'}\rho(\boldsymbol{r'}){r'}^{l}Z_l^m(\theta,\varphi)Z_l^{m*}(\theta',\varphi') && (2.3)\\
&= \sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{l}\frac{1}{r^{l+1}}Z_l^m(\theta,\varphi)\left[\int d\boldsymbol{r'}O_l^m(\theta',\varphi')\rho(\boldsymbol{r'})\right] && (2.4)\\
&=: \sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{l}\frac{1}{r^{l+1}}Z_l^m(\theta,\varphi)Q_l^m && (2.5)
\end{aligned}$$

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

$$\begin{aligned}
O_l^m(\boldsymbol{r}) &:= r^lZ_l^*(\theta,\varphi) = \sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}}r^lY_l^{m*}(\theta,\varphi) && (2.6)\\
Q_l^m &:= \int d\boldsymbol{r'}O_l^m(\theta',\varphi')\rho(\boldsymbol{r'}) && (2.7)
\end{aligned}$$

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

$$Q_0^0 = \int d\boldsymbol{r'}Z_0^0(\theta',\varphi')\rho(\boldsymbol{r'}) = \int d\boldsymbol{r'}\rho(\boldsymbol{r'}) \tag{2.8}$$

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

$$\begin{aligned}
Q_1^1 &= \int d\boldsymbol{r'}r'Z_1^{1*}(\theta',\varphi')\rho(\boldsymbol{r'}) && (2.9)\\
&= \int d\boldsymbol{r'}\left\{-\frac{r'\sin\theta'}{\sqrt{2}}e^{-i\varphi'}\right\}\rho(\boldsymbol{r'}) && (2.10)\\
&= \int d\boldsymbol{r'}\left\{-\frac{x+iy}{\sqrt{2}}\right\}\rho(\boldsymbol{r'}), && (2.11)
\end{aligned}$$

$l=1,\, m=0$ では

$$\begin{aligned}
Q_1^0 &= \int d\boldsymbol{r'}r'Z_1^0(\theta',\varphi')\rho(\boldsymbol{r'}) && (2.12)\\
&= \int d\boldsymbol{r'}r'\cos\theta'\rho(\boldsymbol{r'}) && (2.13)\\
&= \int d\boldsymbol{r'}z\rho(\boldsymbol{r}), && (2.14)
\end{aligned}$$

$l=1,\, m=-1$ では

$$Q_1^{-1} = \int d\boldsymbol{r'} r' Z_1^{-1*}(\theta',\, \varphi')\rho(\boldsymbol{r'}) \tag{2.15}$$

$$= \int d\boldsymbol{r'} \frac{r' \sin\theta'}{\sqrt{2}} e^{-i\varphi'}\rho(\boldsymbol{r'}) \tag{2.16}$$

$$= \int d\boldsymbol{r'} \frac{x+iy}{\sqrt{2}} \rho(\boldsymbol{r'}), \tag{2.17}$$

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、

$$O_2^2(\boldsymbol{r}) = r^2\sqrt{\frac{4\pi}{5}}Y_2^{2*}(\theta,\, \varphi) \tag{2.18}$$

$$= r^2\sqrt{\frac{3}{8}}\sin^2\theta(\cos\varphi - i\sin\varphi)^2 \tag{2.19}$$

$$= r^2\sqrt{\frac{3}{8}}\sin^2\theta(\cos^2\varphi - \sin^2\varphi - 2i\cos\varphi\sin\varphi) \tag{2.20}$$

$$= \sqrt{\frac{3}{8}}(x^2-y^2-2ixy) = \sqrt{\frac{3}{8}}(x-iy)^2, \tag{2.21}$$

$l=2,\, m=1$ のとき

$$O_2^1(\boldsymbol{r}) = r^2\sqrt{\frac{4\pi}{5}}Y_2^{1*}(\theta,\, \varphi) = -\sqrt{\frac{3}{2}}r^2\sin\theta\cos\theta(\cos\varphi - i\sin\varphi) \tag{2.22}$$

$$= \sqrt{\frac{3}{2}}(-xz+iyz) = -\sqrt{\frac{3}{2}}z(x-iy), \tag{2.23}$$

$l=2,\, m=0$ のとき

$$O_2^0 = r^2\sqrt{\frac{4\pi}{5}}Y_2^{0*}(\theta,\, \varphi) \tag{2.24}$$

$$= \frac{r^2}{2}(3\cos^2\theta - 1) = \frac{3z^2-r^2}{2}, \tag{2.25}$$

$l=2,\, m=-1$ のとき

$$O_2^{-1}(\boldsymbol{r}) = r^2\sqrt{\frac{4\pi}{5}}Y_2^{-1*}(\theta,\, \varphi) \tag{2.26}$$

$$= \sqrt{\frac{3}{2}}r^2\sin\theta\cos\theta(\cos\varphi + i\sin\varphi) \tag{2.27}$$

$$= \sqrt{\frac{3}{2}}(xz+iyz) = \sqrt{\frac{3}{2}}z(x+iy), \tag{2.28}$$

$l=2,\, m=-2$ のとき、

$$O_2^{-2}(\boldsymbol{r}) = r^2\sqrt{\frac{4\pi}{5}}Y_2^{2*}(\theta,\, \varphi) = r^2\sqrt{\frac{3}{8}}\sin^2\theta(\cos\varphi + i\sin\varphi)^2 \tag{2.29}$$

$$= r^2\sqrt{\frac{3}{8}}\sin^2\theta(\cos^2\varphi - \sin^2\varphi + 2i\cos\varphi\sin\varphi) \tag{2.30}$$

$$= \sqrt{\frac{3}{8}}(x^2-y^2+2ixy) = \sqrt{\frac{3}{8}}(x+iy)^2, \tag{2.31}$$

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

$$O_3^3(\boldsymbol{r}) = r^3\sqrt{\frac{4\pi}{7}}Y_3^{3*}(\theta,\,\varphi) = -\frac{\sqrt{5}r^3}{4}\sin^3\theta(\cos\varphi - i\sin\varphi)^3 \tag{2.32}$$

$$= -\frac{\sqrt{5}r^3}{4}\sin^3\theta(\cos^3\varphi - 3\cos\varphi\sin^2\varphi + i(\sin^3\varphi - 3\cos^2\varphi\sin\varphi)) \tag{2.33}$$

$$= -\frac{\sqrt{5}}{4}\Big\{x^3 - 3xy^2 + i(y^3 - 3x^2y)\Big\} = -\frac{\sqrt{5}}{4}(x-iy)^3, \tag{2.34}$$

$l=3,\, m=2$ のとき

$$O_3^2(\boldsymbol{r}) = r^3\sqrt{\frac{4\pi}{7}}Y_3^{2*}(\theta,\,\varphi) = \frac{\sqrt{30}r^3}{8}\sin^2\theta\cos\theta(\cos\varphi - i\sin\varphi)^2 \tag{2.35}$$

$$= \frac{\sqrt{30}r^3}{8}\sin^2\theta\cos\theta(\cos^2\varphi - \sin^2\varphi - 2i\cos\varphi\sin\varphi) \tag{2.36}$$

$$= \frac{\sqrt{30}}{8}\Big\{zx^2 - zy^2 - 2ixyz\Big\} = \frac{\sqrt{30}}{8}z(x-iy)^2, \tag{2.37}$$

$l=3,\, m=1$ のとき

$$O_3^1(\boldsymbol{r}) = r^3\sqrt{\frac{4\pi}{7}}Y_3^{1*}(\theta,\,\varphi) \tag{2.38}$$

$$= -r^3\sqrt{\frac{3}{16}}\sin\theta(5\cos^2\theta - 1)(\cos\varphi - i\sin\varphi) \tag{2.39}$$

$$= -\sqrt{\frac{3}{16}}(5z^2 - r^2)(x-iy), \tag{2.40}$$

$l=3,\, m=0$ のとき

$$O_3^(\boldsymbol{r}) = r^3\sqrt{\frac{4\pi}{7}}Y_3^0(\theta,\,\varphi) \tag{2.41}$$

$$= \frac{r^3}{2}(5\cos^2\theta - 3\cos\theta) \tag{2.42}$$

$$= \frac{z(5z^2 - 3r^2)}{2}, \tag{2.43}$$

$l=3,\, m=-1$ のとき

$$O_3^{-1}(\boldsymbol{r}) = r^3\sqrt{\frac{4\pi}{7}}Y_3^{-1*}(\theta,\,\varphi) \tag{2.44}$$

$$= r^3\sqrt{\frac{3}{16}}\sin\theta(5\cos^2 - 1)(\cos\varphi + i\sin\varphi) \tag{2.45}$$

$$= -\sqrt{\frac{3}{16}}(5z^2 - r^2)(x+iy), \tag{2.46}$$

$l=3,\, m=-2$ のとき

$$O_3^{-2}(\boldsymbol{r}) = r^3\sqrt{\frac{4\pi}{7}}Y_3^{-2*}(\theta,\,\varphi) = \frac{\sqrt{30}r^3}{8}\sin^2\theta\cos\theta(\cos\varphi + i\sin\varphi)^2 \tag{2.47}$$

$$= \frac{\sqrt{30}r^3}{8}\sin^2\theta\cos\theta(\cos^2\varphi - \sin^2\varphi + 2i\cos\varphi\sin\varphi) \tag{2.48}$$

$$= \frac{\sqrt{30}}{8}\Big\{zx^2 - zy^2 + 2ixyz\Big\} = \frac{\sqrt{30}}{8}z(x+iy)^2, \tag{2.49}$$

$l=3,\, m=-3$ のとき

$$O_3^3(\boldsymbol{r}) = r^3\sqrt{\frac{4\pi}{7}}Y_3^{3*}(\theta,\,\varphi) = \frac{\sqrt{5}r^3}{4}\sin^3\theta(\cos\varphi + i\sin\varphi)^3 \tag{2.50}$$

$$= \frac{\sqrt{5}r^3}{4}\sin^3\theta(\cos^3\varphi - 3\cos\varphi\sin^2\varphi + i(-\sin^3\varphi - 3\cos^2\varphi\sin\varphi)) \tag{2.51}$$

$$= \frac{\sqrt{5}}{4}\Big\{x^3 - 3xy^2 + i(-y^3 - +3x^2y)\Big\} = \frac{\sqrt{5}}{4}(x+iy)^3, \tag{2.52}$$

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

$$\phi(\boldsymbol{r}) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{l} Q_l^m \frac{Z_l^m(\theta,\,\varphi)}{r^{l+1}} \tag{2.53}$$

の中身がわかった。

2.1.2 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

$$\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r}) = -\boldsymbol{\nabla}\phi(\boldsymbol{r}) = -\sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{l} Q_l^m \boldsymbol{\nabla}\left(\frac{Z_l^m(\theta,\,\varphi)}{r^{l+1}}\right) \tag{2.54}$$

$$= -\sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{l} Q_l^m \left(-\frac{(l+1)Z_l^m(\theta,\,\varphi)}{r^{l+2}}\boldsymbol{e}_r + \frac{\boldsymbol{\nabla} Z_l^m(\theta,\,\varphi)}{r^{l+1}}\right) \tag{2.55}$$

$$\tag{2.56}$$

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

$$\hat{\boldsymbol{L}} = \hat{\boldsymbol{r}} \times \hat{\boldsymbol{p}} = -i\left(\boldsymbol{e}_\varphi \frac{\partial}{\partial\theta} - \boldsymbol{e}_\theta \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) \tag{2.57}$$

であった。これを次のようにする。

$$-\frac{i}{r^2}\boldsymbol{r} \times \hat{\boldsymbol{L}} = \frac{1}{r}\left(\boldsymbol{e}_\theta \frac{\partial}{\partial\theta} + \boldsymbol{e}_\varphi \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) \tag{2.58}$$

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

$$\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r}) = -\sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{l} \frac{Q_l^m}{r^{l+2}} \left(-\frac{(l+1)\boldsymbol{r}Z_l^m(\theta,\,\varphi) + i\boldsymbol{r} \times \left(\hat{\boldsymbol{L}}Z_l^m(\theta,\,\varphi)\right)}{r}\right) \tag{2.59}$$

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、

$$\boldsymbol{Z}_{lm}^{(l+1)}(\theta,\,\varphi) := -\frac{(l+1)\boldsymbol{r}Z_l^m(\theta,\,\varphi) + i\boldsymbol{r} \times \left(\hat{\boldsymbol{L}}Z_l^m(\theta,\,\varphi)\right)}{r\sqrt{l+1}} \tag{2.60}$$

$$\boldsymbol{Y}_{lm}^{(l+1)}(\theta,\,\varphi) := -\frac{(l+1)\boldsymbol{r}Y_l^m(\theta,\,\varphi) + i\boldsymbol{r} \times \left(\hat{\boldsymbol{L}}Y_l^m(\theta,\,\varphi)\right)}{r\sqrt{(l+1)(2l+1)}} \tag{2.61}$$

$$\tag{2.62}$$

で定義される。[*1] これを使うと電場は

$$\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r}) = -\sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{l} \sqrt{l+1}\frac{Q_l^m}{r^{l+2}}\boldsymbol{Z}_{lm}^{(l+1)}(\theta,\,\varphi) = -\sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{l} \sqrt{4\pi(l+1)}\frac{Q_l^m}{r^{l+2}}\boldsymbol{Y}_{lm}^{(l+1)}(\theta,\,\varphi) \tag{2.63}$$

$$\tag{2.64}$$

と書ける。

2.1.3 電気多極子のパリティ

電気多極子の定義は

$$Q_l^m = \int d\boldsymbol{r}\, r^l Z_l^m(\theta,\,\varphi)\rho(\boldsymbol{r}) \tag{2.65}$$

であった。空間反転では $\theta \to \pi - \theta, \quad \varphi \to \varphi \pm 2\pi$ 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ハリティであるため全体としても偶パリティである。

[*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。

2.2 磁気多極子

2.2.1 ベクトルポテンシャル

磁場に関するガウスの法則

$$\boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{B}(\boldsymbol{r})=0 \tag{2.66}$$

より

$$\boldsymbol{B}(\boldsymbol{r})=\boldsymbol{\nabla}\times\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}) \tag{2.67}$$

となるベクトル関数 $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r})$ 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

$$\boldsymbol{\nabla}\times(\boldsymbol{\nabla}\times\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}))=\frac{4\pi}{c}\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r}) \tag{2.68}$$

$$\boldsymbol{\nabla}(\boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}))-\nabla^2\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r})=\frac{4\pi}{c}\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r}) \tag{2.69}$$

$$\nabla^2\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r})=-\frac{4\pi}{c}\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r}) \tag{2.70}$$

最後はクーロンゲージ条件

$$\boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r})=0 \tag{2.71}$$

を用いた。これを多重極展開を用いた解は

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r})&=\frac{1}{c}\int d\boldsymbol{r'}\frac{\rho(\boldsymbol{r'})}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r'}|} &(2.72)\\
&=\frac{1}{c}\sum_{l=0}^{\infty}\frac{1}{r^{l+1}}\int d\boldsymbol{r'}\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r'})r'^{l}P_l(\cos\theta') &(2.73)\\
&=\frac{1}{c}\sum_{l=0}^{\infty}\frac{1}{r^{l+1}}Z_l^m(\theta,\varphi)\int d\boldsymbol{r'}\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r'})r'^{l}Z_l^{m*}(\theta',\varphi') &(2.74)\\
&=\sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{l}\frac{1}{cr^{l+1}}Z_l^m(\theta,\varphi)\int d\boldsymbol{r'}\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r'})O_l^m(\boldsymbol{r'}) &(2.75)
\end{aligned}$$

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 [4]。総和の中は以下のように変形できる。

以下この節は工事中

目標:

$$
\begin{aligned}
&\frac{1}{cr^{l+1}}Z_l^m(\theta,\varphi)\int d\boldsymbol{r'}\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r'})O_l^m(\boldsymbol{r'})\\
&\qquad=\sqrt{\frac{l+1}{l}}\quad\underbrace{\frac{1}{c(l+1)}\int d\boldsymbol{r}[\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r})]\cdot\boldsymbol{\nabla}O_l^m(\boldsymbol{r})}_{=M_m^l}\quad\frac{1}{ir^{l+1}}\quad\underbrace{\frac{\hat{\boldsymbol{L}}Z_l^m(\theta,\varphi)}{\sqrt{l(l+1)}}}_{=\boldsymbol{Z}_{lm}^{(l)}(\boldsymbol{r})}\\
&\qquad-\sqrt{l+1}\underbrace{\frac{1}{c(l+1)}\int d\boldsymbol{r}[\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r})]O_l^m(\boldsymbol{r})}_{=T_m^l}\quad\underbrace{\frac{1}{r^{l+2}}\underbrace{\left[-\frac{1}{r}\frac{(l+1)\boldsymbol{r}Z_l^m(\theta,\varphi)+i\boldsymbol{r}\times[\hat{\boldsymbol{L}}Z_l^m(\theta,\varphi)]}{\sqrt{l+1}}\right]}_{=\boldsymbol{Z}_{lm}^{(l+1)}}}_{=\boldsymbol{\nabla}\left(Z_l^m(\theta,\varphi)/r^{l+1}\right)}
\end{aligned}
\tag{2.76}
$$

変形していく。

$$
\begin{aligned}
\int d\boldsymbol{r'}\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r'})O_l^m(\boldsymbol{r'})&=\boldsymbol{e}_i\int d\boldsymbol{r'}j_iO_l^m &(2.77)\\
&=\boldsymbol{e}_i\int d\boldsymbol{r'}\nabla'\cdot(x_i'\boldsymbol{j})O_l^m &(2.78)\\
&=-\int d\boldsymbol{r'}\boldsymbol{r'}(\boldsymbol{j}\cdot\nabla'O_l^m) &(2.79)\\
&=\int d\boldsymbol{r'}(\boldsymbol{r'}\times\boldsymbol{j})\times\nabla'O_l^m-\int d\boldsymbol{r'}(\boldsymbol{r'}\cdot\boldsymbol{j})\nabla'O_l^m &(2.80)
\end{aligned}
$$

ここで、以前やった

$$
\boldsymbol{\nabla}Z_l^m=\frac{-i}{r^2}\boldsymbol{r}\times\hat{\boldsymbol{L}}Z_l^m \tag{2.81}
$$

に注意すると $\boldsymbol{\nabla}O_l^m$ は

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{\nabla}O_l^m&=\boldsymbol{\nabla}\left(r^lZ_l^m\right) &(2.82)\\
&=lr^{l-1}Z_l^m\boldsymbol{e}_r+r^l\left(-\frac{i}{r^2}\boldsymbol{r}\times\hat{\boldsymbol{L}}Z_l^m\right) &(2.83)\\
&=r^{l-2}\left(l\boldsymbol{r}Z_l^m-i\boldsymbol{r}\times\hat{\boldsymbol{L}}Z_l^m\right) &(2.84)\\
&=\frac{l\boldsymbol{r}O_l^m-i\boldsymbol{r}\times\hat{\boldsymbol{L}}O_l^m}{r^2} &(2.85)
\end{aligned}
$$

と書けるので、第一項の中身は

$$
\begin{aligned}
(\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{j})\times\frac{l\boldsymbol{r}O_l^m-i\boldsymbol{r}\times\hat{\boldsymbol{L}}O_l^m}{r^2}&=-\frac{(\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{j})\times(-i\boldsymbol{r}\times\hat{\boldsymbol{L}}O_l^m)}{r^2} &(2.86)\\
&=\frac{(\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{j})\cdot\hat{\boldsymbol{L}}Z_l^m}{r^2}\boldsymbol{r} &(2.87)\\
&=-(\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{j})\cdot(l\boldsymbol{r}Z_l^m) &(2.88)
\end{aligned}
$$

2.3 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 $\boldsymbol{j}$ を磁荷 ρ_m と磁化電流密度 $\boldsymbol{j}_m$ に置き換えたものを考えることで得られる。

2.3.1 電気多極子 $\leftrightarrow$ 磁気多極子

まず初めに電気多極子の電荷密度を置き換えたものを見る。電荷と分極密度 $\boldsymbol{P}$ の間には

$$\rho(\boldsymbol{r}) = -\boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{P}(\boldsymbol{r}) \tag{2.89}$$

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 $\boldsymbol{M}$ の間には

$$\rho_m(\boldsymbol{r}) = -\boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{M}(\boldsymbol{r}) \tag{2.90}$$

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

$$\tilde{Q}_l^m = \int d\boldsymbol{r}\, O_l^m(\boldsymbol{r})\rho_m(\boldsymbol{r}) = -\int d\boldsymbol{r}\, O_l^m(\boldsymbol{r})\boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{M}(\boldsymbol{r}) = \int d\boldsymbol{r}\, \boldsymbol{M}(\boldsymbol{r})\cdot\nabla O_l^m(\boldsymbol{r}) \tag{2.91}$$

ここである恒等式を示す。まず

$$\begin{aligned}
\frac{1}{c}\int d\boldsymbol{r}\,(\boldsymbol{r}O_l^m(\boldsymbol{r}))\cdot(\boldsymbol{\nabla}\times(\boldsymbol{\nabla}\times\boldsymbol{M}(\boldsymbol{r}))) &= \int d\boldsymbol{r}\,(\boldsymbol{r}O_l^m(\boldsymbol{r}))\cdot(\boldsymbol{\nabla}\times\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r})) = \int d\boldsymbol{r}\,\varepsilon_{ijk}x_iO_l^m(\boldsymbol{r})\partial_j j_k(\boldsymbol{r}) && (2.92)\\
&= \int d\boldsymbol{r}\,\varepsilon_{ijk}\left[\partial_j\left\{x_iO_l^m(\boldsymbol{r})j_k(\boldsymbol{r})\right\} - \varepsilon_{ijk}\partial_j\left\{x_iO_l^m(\boldsymbol{r})\right\}j_k(\boldsymbol{r})\right] && (2.93)\\
&= \int d\boldsymbol{r}\varepsilon_{ikj}x_ij_k(\boldsymbol{r})(\partial_jO_l^m(\boldsymbol{r})) = \int d\boldsymbol{r}\,(\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r}))\cdot\boldsymbol{\nabla}O_l^m(\boldsymbol{r}) && (2.94)
\end{aligned}$$

というように変形できる。また

$$\begin{aligned}
&\int d\boldsymbol{r}\,(\boldsymbol{r}O_l^m(\boldsymbol{r}))\cdot(\boldsymbol{\nabla}\times(\boldsymbol{\nabla}\times\boldsymbol{M}(\boldsymbol{r})))\\
&\qquad= \int d\boldsymbol{r}\,\varepsilon_{ijk}\varepsilon_{kpq}x_iO_l^m\partial_j\partial_pM_q && (2.95)\\
&\qquad= \int d\boldsymbol{r}\,\varepsilon_{ijk}\varepsilon_{kpq}\{\partial_j(x_iO_l^m\partial_pM_q) - \partial_j(x_iO_l^m)\partial_pM_q\} && (2.96)\\
&\qquad= \int d\boldsymbol{r}\,\varepsilon_{ijk}\varepsilon_{kpq}\{-\partial_p(\partial_j(x_iO_l^m)\partial_pM_q) + \partial_p\partial_j(x_iO_l^m)M_q\} && (2.97)\\
&\qquad= \int d\boldsymbol{r}\,\varepsilon_{ijk}\varepsilon_{kpq}\partial_j(\delta_{ip}O_l^m + x_i\partial_pO_l^m)M_q && (2.98)\\
&\qquad= \int d\boldsymbol{r}\,\varepsilon_{pjk}\varepsilon_{kpq}(\partial_jO_l^m)M_q + \int d\boldsymbol{r}\,(\delta_{ip}\delta_{jq} - \delta_{iq}\delta_{jp})\partial_j(x_i\partial_pO_l^m)M_q && (2.99)\\
&\qquad= 2\int d\boldsymbol{r}\,\boldsymbol{M}\cdot\boldsymbol{\nabla}O_l^m(\boldsymbol{r}) + \int d\boldsymbol{r}\,\boldsymbol{M}\cdot\left\{\boldsymbol{\nabla}\cdot(\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{\nabla}O_l^m(\boldsymbol{r}))\right\} - \int d\boldsymbol{r}\,\partial_p(x_q\partial_pO_l^m)M_q && (2.100)
\end{aligned}$$

というように変形できる。第二項の積分の中身は

$$\boldsymbol{\nabla}\cdot(\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{\nabla}O_l^m(\boldsymbol{r})) = \boldsymbol{\nabla}\cdot\left(\boldsymbol{r}\frac{\partial}{\partial r}r^lZ_l^m(\theta,\varphi)\right) = \boldsymbol{\nabla}\cdot\left(\boldsymbol{e}_r\, lr^lZ_l^m(\theta,\varphi)\right) = l\boldsymbol{\nabla}O_l^m(\theta,\varphi) \tag{2.101}$$

第三項の積分の中身は

$$\partial_p(x_q\partial_pO_l^m)M_q = (\partial_px_q)\partial_pO_m^lM_q + x_qM_q\partial_p\partial_pO_l^m = \boldsymbol{M}\cdot\boldsymbol{\nabla}O_l^m(\boldsymbol{r}) + \boldsymbol{r}\cdot\nabla^2O_m^l(\boldsymbol{r}) \tag{2.102}$$

となる。$O_l^m(\boldsymbol{r})$ はラプラス方程式の解であるのでこれの第二項は 0 となる。以上より

$$\int d\boldsymbol{r}\,(\boldsymbol{r}O_l^m(\boldsymbol{r}))\cdot(\boldsymbol{\nabla}\times(\boldsymbol{\nabla}\times\boldsymbol{M}(\boldsymbol{r}))) = (l+1)\int d\boldsymbol{r}\,\boldsymbol{M}(\boldsymbol{r})\cdot\boldsymbol{\nabla}O_l^m(\boldsymbol{r}) \tag{2.103}$$

が言える。示したかった恒等式

$$c(l+1)\int d\boldsymbol{r}\,\boldsymbol{M}(\boldsymbol{r})\cdot\boldsymbol{\nabla}O_l^m(\boldsymbol{r})=\int d\boldsymbol{r}\,(\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r}))\cdot\boldsymbol{\nabla}O_l^m(\boldsymbol{r}) \tag{2.104}$$

が導けた。これをもともと考えてた式に入れると

$$\tilde{Q}_l^m=\int d\boldsymbol{r}\,\boldsymbol{M}(\boldsymbol{r})\cdot\boldsymbol{\nabla}O_l^m(\boldsymbol{r}) \tag{2.105}$$

$$=\frac{1}{c(l+1)}\int d\boldsymbol{r}\,(\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r}))\cdot\boldsymbol{\nabla}O_l^m(\boldsymbol{r})=M_l^m \tag{2.106}$$

というように磁気多極子を得られた。

では電流を磁流に置き換える。電流は $\boldsymbol{j}=c\boldsymbol{\nabla}\times\boldsymbol{M}$ であるので、磁流を $\boldsymbol{j}_m=c\boldsymbol{\nabla}\times\boldsymbol{P}$ であると考える。M_l^m の電流を磁流に置き換えたものを $\tilde{M}_l^m$ とすると先ほどの変形を使って

$$\tilde{M}_l^m=\frac{1}{c(l+1)}\int d\boldsymbol{r}\,(\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{j}_m(\boldsymbol{r}))\cdot\boldsymbol{\nabla}O_l^m \tag{2.107}$$

$$=\frac{1}{l+1}\int d\boldsymbol{r}\,(\boldsymbol{r}\times(\boldsymbol{\nabla}\times\boldsymbol{P}(\boldsymbol{r})))\cdot\boldsymbol{\nabla}O_l^m \tag{2.108}$$

$$=\int d\boldsymbol{r}\;\boldsymbol{P}(\boldsymbol{r})\cdot\boldsymbol{\nabla}O_l^m(\boldsymbol{r})=\int d\boldsymbol{r}\;\rho(\boldsymbol{r})O_l^m(\boldsymbol{r}) \tag{2.109}$$

というように電気多極子 Q_l^m が得られる。最後は部分積分をして、$\rho=-\boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{P}$ を使った。

2.3.2 電気トロイダル多極子

では、相方がまだ出ていない磁気トロイダル多極子に対しても電荷・磁荷変換を行う。そうしたものを $\tilde{T}_l^m$ として、$\boldsymbol{P}=\boldsymbol{\nabla}\times\boldsymbol{G}$ という量も導入すると、

$$\tilde{T}_l^m=\frac{1}{c(l+1)}\int d\boldsymbol{r}\,(\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{j}_m(\boldsymbol{r}))O_l^m(\boldsymbol{r})=\frac{1}{l+1}\int d\boldsymbol{r}\,(\boldsymbol{r}\cdot(\boldsymbol{\nabla}\times\boldsymbol{P}(\boldsymbol{r})))O_l^m(\boldsymbol{r}) \tag{2.110}$$

$$=\frac{1}{l+1}\int d\boldsymbol{r}\,\varepsilon_{ijk}\partial_j(r_iP_kO_l^m(\boldsymbol{r}))-\frac{1}{l+1}\int d\boldsymbol{r}\,\varepsilon_{ijk}\partial_j(r_i)P_kO_l^m(\boldsymbol{r})-\frac{1}{l+1}\int d\boldsymbol{r}\,\varepsilon_{ijk}r_iP_k\partial_jO_l^m(\boldsymbol{r}) \tag{2.111}$$

$$=\frac{1}{l+1}\int d\boldsymbol{r}\,(\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{P}(\boldsymbol{r}))\cdot\boldsymbol{\nabla}O_l^m(\boldsymbol{r})=\frac{1}{l+1}\int d\boldsymbol{r}\,(\boldsymbol{r}\times(\boldsymbol{\nabla}\times\boldsymbol{G}(\boldsymbol{r})))\cdot\boldsymbol{\nabla}O_l^m(\boldsymbol{r}) \tag{2.112}$$

$$=\int d\boldsymbol{r}\;\boldsymbol{G}(\boldsymbol{r})\cdot\boldsymbol{\nabla}O_l^m(\boldsymbol{r})\equiv G_l^m \tag{2.113}$$

というようになにか得られた。G_l^m を電気トロイダル多極子、$\boldsymbol{G}$ を電気トロイダル分極と呼ぶ。

電荷・磁荷変換を施したマクスウェル方程式は

$$\boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{E}=0 \tag{2.114}$$

$$\boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{B}=4\pi\rho_m \tag{2.115}$$

$$\boldsymbol{\nabla}\times\boldsymbol{E}=\frac{4\pi}{c}\boldsymbol{j}_m \tag{2.116}$$

$$\boldsymbol{\nabla}\times\boldsymbol{B}=0 \tag{2.117}$$

というようになる。この式を見ると $\phi(\boldsymbol{r}),\,\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r})$ を電荷・磁荷変換を施したポテンシャル $\tilde{\phi}(\boldsymbol{r}),\,\tilde{\boldsymbol{A}}(\boldsymbol{r})$ は

$$\boldsymbol{B}=-\boldsymbol{\nabla}\tilde{\phi}(\boldsymbol{r})\qquad\boldsymbol{E}=\boldsymbol{\nabla}\times\tilde{\boldsymbol{A}}(\boldsymbol{r}) \tag{2.118}$$

となる。これを解くと

$$\tilde{\phi}(\boldsymbol{r})=\sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{l}M_l^m\frac{Z_l^m(\theta,\varphi)}{r^{l+1}} \tag{2.119}$$

$$\tilde{\boldsymbol{A}}(\boldsymbol{r})=\sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{l}\left[\sqrt{\frac{4\pi(l+1)}{(2l+1)l}}Q_l^m\frac{\boldsymbol{Y}_{lm}^{(l)}}{ir^{l+1}}-\sqrt{4\pi(l+1)}G_l^m\frac{\boldsymbol{Y}_{lm}^{(l+1)}}{r^{l+2}}\right] \tag{2.120}$$

となることが予想される。

2.4　まとめ

いろいろな量が出てきた。それらの関係をまとめておこう。電荷・磁荷・電流・磁流、分極・磁化・磁気トロイダル分極・電気トロイダル分極の関係は次のようになっている。

$$\rho(\boldsymbol{r}) = -\boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{P}(\boldsymbol{r}), \qquad \rho_m(\boldsymbol{r}) = -\boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{M}(\boldsymbol{r}) \tag{2.121}$$
$$\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r}) = c\boldsymbol{\nabla}\times\boldsymbol{M}(\boldsymbol{r}), \qquad \boldsymbol{j}_m(\boldsymbol{r}) = c\boldsymbol{\nabla}\times\boldsymbol{P}(\boldsymbol{r}) \tag{2.122}$$
$$\boldsymbol{M}(\boldsymbol{r}) = \boldsymbol{\nabla}\times\boldsymbol{T}(\boldsymbol{r}), \qquad \boldsymbol{P}(\boldsymbol{r}) = \boldsymbol{\nabla}\times\boldsymbol{G}(\boldsymbol{r}) \tag{2.123}$$
$$\boldsymbol{T} = \frac{1}{l+1}\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{M}(\boldsymbol{r}), \qquad \boldsymbol{G}(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{l+1}\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{P}(\boldsymbol{r}) \tag{2.124}$$

こうして得られた多極子をまとめると、

$$Q_l^m = \int d\boldsymbol{r}\,\rho(\boldsymbol{r})O_l^m(\boldsymbol{r}) = \int d\boldsymbol{r}\,\boldsymbol{P}(\boldsymbol{r})\cdot\boldsymbol{\nabla}O_l^m(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{c(l+1)}\int d\boldsymbol{r}\,(\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{j}_m(\boldsymbol{r}))\cdot\boldsymbol{\nabla}O_l^m(\boldsymbol{r}) \tag{2.125}$$
$$M_l^m = \int d\boldsymbol{r}\,\rho_m(\boldsymbol{r})O_l^m(\boldsymbol{r}) = \int d\boldsymbol{r}\,\boldsymbol{M}(\boldsymbol{r})\cdot\boldsymbol{\nabla}O_l^m(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{c(l+1)}\int d\boldsymbol{r}\,(\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r}))\cdot\boldsymbol{\nabla}O_l^m(\boldsymbol{r}) \tag{2.126}$$
$$T_l^m = \int d\boldsymbol{r}\,\boldsymbol{T}(\boldsymbol{r})\cdot\boldsymbol{\nabla}O_l^m(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{l+1}\int d\boldsymbol{r}\,(\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{M}(\boldsymbol{r}))\cdot\boldsymbol{\nabla}O_l^m(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{c(l+1)}\int d\boldsymbol{r}\,(\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r}))O_l^m(\boldsymbol{r}) \tag{2.127}$$
$$G_l^m = \int d\boldsymbol{r}\,\boldsymbol{G}(\boldsymbol{r})\cdot\boldsymbol{\nabla}O_l^m(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{l+1}\int d\boldsymbol{r}\,(\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{P}(\boldsymbol{r}))\cdot\boldsymbol{\nabla}O_l^m(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{c(l+1)}\int d\boldsymbol{r}\,(\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{j}_m(\boldsymbol{r}))O_l^m(\boldsymbol{r}) \tag{2.128}$$

また、空間反転に関するパリティは

$$\mathcal{P}\rho = +\rho, \qquad \mathcal{P}\rho_m = -\rho_m, \qquad \mathcal{P}\boldsymbol{j} = -\boldsymbol{j}, \qquad \mathcal{P}\boldsymbol{j}_m = +\boldsymbol{j}_m \tag{2.129}$$
$$\mathcal{P}Q_l^m = (-1)^l Q_l^m, \qquad \mathcal{P}M_l^m = (-1)^{l+1}M_l^m, \qquad \mathcal{P}T_l^m = (-1)^l T_l^m, \qquad \mathcal{P}G_l^m = (-1)^{l+1}G_l^m \tag{2.130}$$

時間反転に関するパリティは

$$\mathcal{T}\rho = +\rho, \qquad \mathcal{T}\rho_m = -\rho_m, \qquad \mathcal{T}\boldsymbol{j} = -\boldsymbol{j}, \qquad \mathcal{T}\boldsymbol{j}_m = +\boldsymbol{j}_m \tag{2.131}$$
$$\mathcal{T}Q_l^m = +Q_l^m, \qquad \mathcal{T}M_l^m = -M_l^m, \qquad \mathcal{T}T_l^m = -T_l^m, \qquad \mathcal{T}G_l^m = +G_l^m \tag{2.132}$$

となる。

2.5　分極密度による表示 (おまけ)

あまりモチベーションはわからないが、トロイダル分極を密度表示するというのも考えられる。

$$\rho_t(\boldsymbol{r}) = -\boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{T}(\boldsymbol{r}) \qquad \rho_g(\boldsymbol{r}) = -\boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{G}(\boldsymbol{r}) \tag{2.133}$$

これを用いて磁気トロイダル多極子と電気トロイダル多極子を表示すると

$$T_l^m = \int d\boldsymbol{r}\,\boldsymbol{T}(\boldsymbol{r})\cdot\boldsymbol{\nabla}O_l^m(\boldsymbol{r}) = \int d\boldsymbol{r}\,\rho_t(\boldsymbol{r})O_l^m(\boldsymbol{r}) \tag{2.134}$$
$$G_l^m = \int d\boldsymbol{r}\,\boldsymbol{G}(\boldsymbol{r})\cdot\boldsymbol{\nabla}O_l^m(\boldsymbol{r}) = \int d\boldsymbol{r}\,\rho_g(\boldsymbol{r})O_l^m(\boldsymbol{r}) \tag{2.135}$$

となる。これらトロイダル分極密度のパリティは

$$\mathcal{P}\rho_t = +\rho_t, \qquad \mathcal{P}\rho_g = -\rho_g \tag{2.136}$$
$$\mathcal{T}\rho_t = -\rho_t, \qquad \mathcal{T}\rho_g = +\rho_g \tag{2.137}$$

となる。また、密度があるなら流れもあるだろうということで流れを考えると

$$\boldsymbol{j}_t = c\boldsymbol{\nabla}\times\boldsymbol{G}(\boldsymbol{r}) = c\boldsymbol{P} \qquad \boldsymbol{j}_g = c\boldsymbol{\nabla}\times\boldsymbol{T}(\boldsymbol{r}) = c\boldsymbol{M} \tag{2.138}$$

というようになる。

2.6 コメント

もともとポアソン方程式だけ見ると引数や演算子に時間は入ってこないため、時間反転というのは考えることはできない。どこから時間反転の話が入ってくるかというと、ソースである電流から来ているように見える。またある意味、単磁荷を導入したのも時間反転を導入するためである。なんというか、ここら辺は物理的直観で導出したなんとも不思議な性質である。

相対論的電磁気学という面から多極子を見るというのもありなのだろうか? 一種の極限でこのような性質が見れるというのもあるし、モノポールを入れた電磁気の一種として見るのもおもしいのかもしれない。また、角運動量演算子のような位置と微分が絡まった演算子がさらにバリエーションが増えるのも考えられる。

第 3 章

多極子と量子論

3.1　ミクロな多極子の演算子表現

電気多極子演算子の導出

電荷密度演算子 $\hat{\rho}(\boldsymbol{r})$ を周りの位置 $\boldsymbol{r}_j$ にある電子からの寄与として表す。

$$\hat{\rho}(\boldsymbol{r}) = -e\sum_j \delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_j) \tag{3.1}$$

これより、電気多極子演算子は

$$\hat{G}_l^m(\boldsymbol{r}) = \int d\boldsymbol{r'}\, O_l^m(\boldsymbol{r'})\hat{(}\boldsymbol{r'}) = -e\sum_j \int d\boldsymbol{r'}\, O_l^m(\boldsymbol{r'})\delta(\boldsymbol{r'}-\boldsymbol{r'}) = -e\sum_j O_l^m(\boldsymbol{r_j}) \tag{3.2}$$

となる。

磁気多極子演算子の導出

次に、磁気多極子の演算子表現を得るため、電流の由来は軌道運動と、スピンによるものの 2 つがあるので、それぞれの電流演算子を $\hat{\boldsymbol{j}}^{(o)}(\boldsymbol{r})$, $\hat{\boldsymbol{j}}^{(s)}(\boldsymbol{r})$ とする。まずは磁化 $\boldsymbol{M}$ を求めいこう。軌道運動による磁化は角運動量にボーア磁子をかけたものであることより位置 $\boldsymbol{r}_j$ における角運動量の作る磁化を足していくと、

$$\hat{\boldsymbol{M}}^{(o)}(\boldsymbol{r}) := -\mu_B\sum_j \hat{\boldsymbol{L}}_j\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_j) \tag{3.3}$$

となる。[*1] 古典電磁気との類推により

$$\hat{\boldsymbol{M}}^{(o)}(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{2c}\boldsymbol{r}\times\hat{\boldsymbol{j}}^{(o)}(\boldsymbol{r}) \tag{3.4}$$

を満たすと考えられる。この形ならば、磁気多極子の定義の中に現れているのでこれより磁気多極子の軌道成分は

$$\begin{aligned}
\hat{M}_m^{l(o)} &= \frac{1}{c(l+1)}\int d\boldsymbol{r'}\,(\boldsymbol{r'}\times\hat{\boldsymbol{j}}^{(o)}(\boldsymbol{r'}))\cdot\boldsymbol{\nabla}O_l^m(\boldsymbol{r'}) && (3.5)\\
&= \frac{1}{l+1}\int d\boldsymbol{r'}\left(-2\mu_B\sum_j \hat{\boldsymbol{L}}_j\delta(\boldsymbol{r'}-\boldsymbol{r}_j)\right)\cdot\boldsymbol{\nabla}O_l^m(\boldsymbol{r'}) && (3.6)\\
&= -\mu_B\sum_j \boldsymbol{\nabla}O_l^m(\boldsymbol{r}_j)\cdot\frac{2\hat{\boldsymbol{L}}_j}{l+1} && (3.7)
\end{aligned}$$

となる。スピンによる磁化はパウリ演算子を σ として

$$\boldsymbol{M}^{(s)}(\boldsymbol{r}) = -\mu_B\sum_j \sigma_j\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_j) \tag{3.8}$$

でとなる。また、磁化を使うと電流は $\boldsymbol{j} = c\boldsymbol{\nabla}\times\boldsymbol{M}$ よりスピンの電流は

$$\hat{\boldsymbol{j}}^{(s)}(\boldsymbol{r}) = c\boldsymbol{\nabla}\times\boldsymbol{M}^{(s)}(\boldsymbol{r}) \tag{3.9}$$

[*1] この文章内では $\hat{\boldsymbol{L}} = -i\boldsymbol{r}\times\nabla$

これより

$$\hat{M}_m^{j(s)} = \int \boldsymbol{r'}\, \boldsymbol{M}^{(s)} \cdot \boldsymbol{\nabla} O_l^m(\boldsymbol{r'}) \tag{3.10}$$

$$= -\mu_B \int d\boldsymbol{r'} \left\{ \sum_j \sigma_j \delta(\boldsymbol{r'} - \boldsymbol{r}_j) \right\} \cdot \boldsymbol{\nabla} O_l^m(\boldsymbol{r'}) \tag{3.11}$$

$$= -\mu_B \sum_j \boldsymbol{\nabla} O_l^m(\boldsymbol{r}_j) \cdot \sigma_j \tag{3.12}$$

なので磁気多極子演算子は

$$\hat{M}_l^m = -\mu_B \sum_j \boldsymbol{\nabla} O_l^m(\boldsymbol{r}_j) \cdot \boldsymbol{m}_l(\boldsymbol{r}_j) \tag{3.13}$$

$$\boldsymbol{m}_l(\boldsymbol{r}) = \frac{2\hat{\boldsymbol{L}}}{l+1} + \sigma \tag{3.14}$$

というように得られる。

3.1.1 磁気トロイダル多極子演算子の導出

同様にして軌道成分とスピン成分にわけて、磁気トロイダル多極子の演算子を導出しよう。$\boldsymbol{\nabla} \cdot \boldsymbol{j} = c\boldsymbol{\nabla} \cdot \boldsymbol{\nabla} \times \boldsymbol{M} = 0$ のもと成り立つ次の関係式を使う

$$\int d\boldsymbol{r}\, (\boldsymbol{r} \times (\boldsymbol{r} \times \boldsymbol{j})) \cdot \boldsymbol{\nabla} O_l^m(\boldsymbol{r})$$

$$= \int d\boldsymbol{r} \left[\boldsymbol{\nabla} \cdot \Big\{ (\boldsymbol{r} \times (\boldsymbol{r} \times \boldsymbol{j}))\, O_l^m(\boldsymbol{r}) \Big\} - O_l^m(\boldsymbol{r}) \boldsymbol{\nabla} \cdot (\boldsymbol{r} \times (\boldsymbol{r} \times \boldsymbol{j})) \right] = -\int d\boldsymbol{r}\, \varepsilon_{ijk} \varepsilon_{kpq} \partial_i (x_j x_p j_q) O_l^m \tag{3.15}$$

$$= -\int d\boldsymbol{r}\, \varepsilon_{ijk} \varepsilon_{kpq} (\delta_{ij} x_p j_q + x_j \delta_{ip} j_q + x_j x_p (\partial_i j_q)) O_l^m \tag{3.16}$$

$$= \int d\boldsymbol{r} \left[-\varepsilon_{pjk} \varepsilon_{kpq} x_j j_q O_l^m(\boldsymbol{r}) - (\delta_{ip}\delta_{jq} - \delta_{iq}\delta_{jp}) x_j x_p (\partial_i j_q) O_l^m(\boldsymbol{r}) \right] \tag{3.17}$$

$$= \int d\boldsymbol{r} \left[-2(\boldsymbol{r} \cdot \boldsymbol{j}(\boldsymbol{r})) O_l^m(\boldsymbol{r}) - x_q x_p (\partial_p j_q) O_l^m(\boldsymbol{r}) + r^2 (\boldsymbol{\nabla} \cdot \boldsymbol{j}(\boldsymbol{r})) O_l^m(\boldsymbol{r}) \right] \tag{3.18}$$

$$= \int d\boldsymbol{r} \left[-2(\boldsymbol{r} \cdot \boldsymbol{j}(\boldsymbol{r})) O_l^m(\boldsymbol{r}) - \partial_p (x_q x_p j_q O_l^m(\boldsymbol{r})) + \partial_p (x_q x_p) j_q O_l^m(\boldsymbol{r}) + x_q x_p j_q (\partial_q O_l^m(\boldsymbol{r})) \right] \tag{3.19}$$

$$= \int d\boldsymbol{r} \left[-2(\boldsymbol{r} \cdot \boldsymbol{j}(\boldsymbol{r})) O_l^m(\boldsymbol{r}) + 3 x_q j_q O_l^m(\boldsymbol{r}) + \delta_{pq} x_q j_q O_l^m(\boldsymbol{r}) + (\boldsymbol{r} \cdot \boldsymbol{j}(\boldsymbol{r})) \Big\{ \boldsymbol{r} \cdot \boldsymbol{\nabla} O_l^m(\boldsymbol{r}) \Big\} \right] \tag{3.20}$$

$$= \int d\boldsymbol{r} \left[2(\boldsymbol{r} \cdot \boldsymbol{j}(\boldsymbol{r})) O_l^m(\boldsymbol{r}) + (\boldsymbol{r} \cdot \boldsymbol{j}(\boldsymbol{r})) \Big\{ r \frac{\partial}{\partial r} r^l Z_l^m(\theta, \varphi) \Big\} \right] \tag{3.21}$$

$$= (l+2) \int d\boldsymbol{r}\, (\boldsymbol{r} \cdot \boldsymbol{j}(\boldsymbol{r})) O_l^m(\boldsymbol{r}) \tag{3.22}$$

これより、

$$\hat{T}_l^{m(o)} = \frac{1}{c(l+1)} \int d\boldsymbol{r}\, (\boldsymbol{r} \cdot \hat{\boldsymbol{j}}^{(o)}(\boldsymbol{r})) O_l^m(\boldsymbol{r}) \tag{3.23}$$

$$= \frac{1}{c(l+1)(l+2)} \int d\boldsymbol{r}\, (\boldsymbol{r} \times (\boldsymbol{r} \times \hat{\boldsymbol{j}}^{(o)})) \cdot \boldsymbol{\nabla} O_l^m(\boldsymbol{r}) \tag{3.24}$$

$$= \frac{-2\mu_B}{(l+1)(l+2)} \sum_j (\boldsymbol{r}_j \times \hat{\boldsymbol{L}}_j) \cdot \boldsymbol{\nabla} O_l^m(\boldsymbol{r}_j) \tag{3.25}$$

スピンについては

$$\boldsymbol{r} \cdot \hat{\boldsymbol{j}}^{(s)}(\boldsymbol{r}) = c\boldsymbol{r} \cdot (\boldsymbol{\nabla} \times \boldsymbol{M}^{(s)}(\boldsymbol{r})) = -c\boldsymbol{\nabla} \cdot \Big(\boldsymbol{r} \times \boldsymbol{M}^{(s)}(\boldsymbol{r}) \Big) \tag{3.26}$$

を使うと

$$T_l^{m(s)} = -\frac{1}{l+1}\int d\boldsymbol{r}\, O_l^m(\boldsymbol{r})\boldsymbol{\nabla}\cdot\Big(\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{M}^{(s)}(\boldsymbol{r})\Big) \tag{3.27}$$

$$= \frac{1}{l+1}\int d\boldsymbol{r}\,(\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{M}^{(s)}(\boldsymbol{r}))\cdot\boldsymbol{\nabla}O_l^m(\boldsymbol{r}) \tag{3.28}$$

$$= -\frac{\mu_B}{l+1}\sum_j(\boldsymbol{r}_j\times\sigma_j)\cdot\boldsymbol{\nabla}O_l^m(\boldsymbol{r}_j) \tag{3.29}$$

よって、磁気トロイダル多極子演算子は

$$\hat{T}_l^m = -\mu_B\sum_j \boldsymbol{t}_j(\boldsymbol{r}_j)\cdot\boldsymbol{\nabla}O_l^m(\boldsymbol{r}_j) \tag{3.30}$$

$$\boldsymbol{t}_j(\boldsymbol{r}_j) = \frac{\boldsymbol{r_j}}{l+1}\times\left(\frac{2\hat{\boldsymbol{L}}_j}{l+2}+\sigma_j\right) \tag{3.31}$$

となる。ただ、実際には $\boldsymbol{t}_j$ 内の演算子を対象化してエルミートにすることで、磁気トロイダル多極子演算子の固有値を実数にする必要がある。

電気トロイダル多極子の導出

参考文献

[1] Hans J. Weber Gerge R. Arfken. 特殊関数. 講談社, 第 4 版, 2001.

[2] 砂川重信. 理論電磁気学. 紀伊国屋書店, 第 3 版, 1999.

[3] 前野昌弘. よくわかる量子力学. 東京図書, 2011.

[4] Stefan Nanz. *Toroidal Multipole Moments in Classical ELectrodynamics*. Springer, 2016.