G.3　球座標系

最後に３次元極座標系（球座標系）(r,θ,φ) を考察する。デカルト座標系との関係は

$$x = r\sin\theta\cos\varphi, \quad y = r\sin\theta\sin\varphi, \quad z = r\cos\theta \tag{G.13}$$

であり、線素および無限小体積要素は

$$ds^2 = dr^2 + (rd\theta)^2 + (r\sin\theta d\varphi)^2, \tag{G.14}$$

$$d^3V = dr\,rd\theta\,r\sin\theta d\varphi = r^2\sin\theta\,dr\,d\theta\,d\varphi \tag{G.15}$$

で与えられる。スカラー関数 f の勾配は、したがって

$$\vec{\nabla}f = \left(\frac{\partial}{\partial r}f\right)\vec{e}_r + \left(\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}f\right)\vec{e}_\theta + \left(\frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}f\right)\vec{e}_\varphi \tag{G.16}$$

と求められる。デカルト座標の場合と同様に積分

$$\begin{aligned}
I &\equiv \hbar^2\int d^3V\,(\vec{\nabla}f_1^*)\cdot(\vec{\nabla}f_2)\\
&= \hbar^2\int_0^\infty dr\int_0^\pi d\theta\int_0^{2\pi}d\varphi\,r^2\sin\theta\left[\left(\frac{\partial f_1^*}{\partial r}\right)\left(\frac{\partial f_2}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2}\left(\frac{\partial f_1^*}{\partial\theta}\right)\left(\frac{\partial f_2}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{r^2\sin^2\theta} + \left(\frac{\partial f_1^*}{\partial\varphi}\right)\left(\frac{\partial f_2}{\partial\varphi}\right)\right]
\end{aligned}$$

を考え、部分積分をすることでラプラシアンを導出しよう。部分積分の結果は

$$I = -\hbar^2\int d^3V f_1^*\left[\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}f_2\right) + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}f_2\right) + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}f_2\right]$$

であり、これをラプラシアンを使った表式

$$I = -\hbar^2\int d^3V\,f_1^*\Delta f_2$$

と比較することで、球座標系でのラプラシアンが

$$\Delta f = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}f\right) + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}f\right) + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}f \tag{G.17}$$

と求められる。

H　球座標における角運動量の微分演算子

H.1　２次元極座標

２次元極座標 (r,θ)

$$x = r\cos\theta, \qquad y = r\sin\theta \tag{H.1}$$

において、角運動量に対応する微分演算子

$$L^{\rm op} = xp_y^{\rm op} - yp_x^{\rm op} = -i\hbar\left[x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right] \tag{H.2}$$

を求めよう。ここで

$$p_x^{\rm op} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}, \quad p_y^{\rm op} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial y} \tag{H.3}$$

である。微分のチェーン則

$$\frac{\partial}{\partial r} = \frac{\partial x}{\partial r}\frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial y}{\partial r}\frac{\partial}{\partial y}, \quad \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial \theta} = \frac{1}{r}\frac{\partial x}{\partial \theta}\frac{\partial}{\partial x} + \frac{1}{r}\frac{\partial y}{\partial \theta}\frac{\partial}{\partial y}, \tag{H.4}$$

と極座標の定義式 (H.1) より

$$\begin{pmatrix} \dfrac{\partial}{\partial r} \\ \dfrac{1}{r}\dfrac{\partial}{\partial \theta} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta \\ -\sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \dfrac{\partial}{\partial x} \\ \dfrac{\partial}{\partial y} \end{pmatrix} \tag{H.5}$$

はすぐにわかる。これから

$$\begin{pmatrix} \dfrac{\partial}{\partial x} \\ \dfrac{\partial}{\partial y} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\theta & -\sin\theta \\ \sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \dfrac{\partial}{\partial r} \\ \dfrac{1}{r}\dfrac{\partial}{\partial \theta} \end{pmatrix} \tag{H.6}$$

を得るのも容易である。２次元極座標の定義式 (H.1) と式 (H.6) を角運動量に対応する微分演算子の式 (H.2) に代入すると

$$L^{\mathrm{op}} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial \theta} \tag{H.7}$$

を得る。

H.2　３次元極座標（球座標）

次に、３次元極座標系（球座標系）(r, θ, φ)

$$x = r\sin\theta\cos\varphi, \quad y = r\sin\theta\sin\varphi, \quad z = r\cos\theta \tag{H.8}$$

における角運動量に対応する微分演算子

$$L_x^{\mathrm{op}} = y\,p_z^{\mathrm{op}} - z\,p_y^{\mathrm{op}}, \quad L_y^{\mathrm{op}} = z\,p_x^{\mathrm{op}} - x\,p_z^{\mathrm{op}}, \quad L_z^{\mathrm{op}} = x\,p_y^{\mathrm{op}} - y\,p_x^{\mathrm{op}} \tag{H.9}$$

を求めよう。ここで、運動量に対応する微分演算子は

$$p_x^{\mathrm{op}} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}, \quad p_y^{\mathrm{op}} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial y}, \quad p_z^{\mathrm{op}} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial z} \tag{H.10}$$

である。２次元極座標での計算と同様に、微分のチェーン則と球座標の定義 (H.8) を用いると

$$\begin{pmatrix} \dfrac{\partial}{\partial r} \\ \dfrac{1}{r}\dfrac{\partial}{\partial \theta} \\ \dfrac{1}{r\sin\theta}\dfrac{\partial}{\partial \varphi} \end{pmatrix} = U \begin{pmatrix} \dfrac{\partial}{\partial x} \\ \dfrac{\partial}{\partial y} \\ \dfrac{\partial}{\partial z} \end{pmatrix}, \qquad U = \begin{pmatrix} \sin\theta\cos\varphi & \sin\theta\sin\varphi & \cos\theta \\ \cos\theta\cos\varphi & \cos\theta\sin\varphi & -\sin\theta \\ -\sin\varphi & \cos\varphi & 0 \end{pmatrix} \tag{H.11}$$

と計算できる。式 (H.11) において、行列 U は直交行列であることに注意。従って、その逆行列は

$$U^{-1} = U^{\dagger} = \begin{pmatrix} \sin\theta\cos\varphi & \cos\theta\cos\varphi & -\sin\varphi \\ \sin\theta\sin\varphi & \cos\theta\sin\varphi & \cos\varphi \\ \cos\theta & -\sin\theta & 0 \end{pmatrix} \tag{H.12}$$

で与えられ、

$$\begin{pmatrix} \dfrac{\partial}{\partial x} \\ \dfrac{\partial}{\partial y} \\ \dfrac{\partial}{\partial z} \end{pmatrix} = U^{-1} \begin{pmatrix} \dfrac{\partial}{\partial r} \\ \dfrac{1}{r}\dfrac{\partial}{\partial \theta} \\ \dfrac{1}{r\sin\theta}\dfrac{\partial}{\partial \varphi} \end{pmatrix} \tag{H.13}$$

と求まる。3 次元運動量の微分演算子の式 (H.10) に式 (H.13) を代入し、さらに 3 次元角運動量の式 (H.9) に、式 (H.8), と (H.10) を代入することで

$$\begin{aligned} L_x^{\rm op} &= i\hbar\left[\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} + \cos\varphi\frac{\cos\theta}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right], \\ L_y^{\rm op} &= i\hbar\left[-\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} + \sin\varphi\frac{\cos\theta}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right], \\ L_z^{\rm op} &= -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi} \end{aligned} \tag{H.14}$$

が得られる。

I 球面調和関数

球面調和関数 $Y_{\ell m}(\theta,\varphi)$ は、球座標系 (r,θ,φ)

$$x = r\sin\theta\cos\varphi, \quad y = r\sin\theta\sin\varphi, \quad z = r\cos\theta$$

における固有値方程式

$$(\vec{L}^{\rm op})^2 Y_{\ell m}(\theta,\varphi) = \hbar^2\ell(\ell+1)Y_{\ell m}(\theta,\varphi), \qquad (\ell \geq 0),$$

$$L_z^{\rm op} Y_{\ell m}(\theta,\varphi) = \hbar m Y_{\ell m}(\theta,\varphi),$$

の解である。この付録では球面調和関数の具体形の計算方法を説明する。

I.1 $(\vec{L}^{\rm op})^2$ の具体形

付録 §. H.2 において、球面調和関数の定義に現れる微分演算子 $L_z^{\rm op}$ の具体形はすでに求まっている。ここでは、球面調和関数を定義するのに用いられるもう一つの微分演算子である $(\vec{L}^{\rm op})^2$ の具体形を求めよう。

計算の方法はいくつかあるが、ここではふたつのやり方を紹介しよう。

最初の方法は、式 (H.14) の結果を愚直に使って

$$-\frac{1}{\hbar^2}(\vec{L}^{\rm op})^2 = \left[s_\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} + c_\varphi\frac{c_\theta}{s_\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right]\left[s_\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} + c_\varphi\frac{c_\theta}{s_\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right] + \left[-c_\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} + s_\varphi\frac{c_\theta}{s_\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right]\left[-c_\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} + s_\varphi\frac{c_\theta}{s_\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right] + \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}$$

を計算するやり方である。ここでは、表記のスペースの節約のため、

$$s_\theta = \sin\theta, \quad c_\theta = \cos\theta, \quad s_\varphi = \sin\varphi, \quad c_\varphi = \cos\varphi$$