球面調和関数

update:2017 June 09, presented by Sho K. NAKAMURA

Spherical harmonics

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial Y(\theta,\varphi)}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2 Y(\theta,\varphi)}{\partial\varphi^2}+\ell(\ell+1)Y(\theta,\varphi)=0 \tag{1}$$

の解 $Y(\theta,\varphi)$ を $Y(\theta,\varphi)=\Theta(\theta)\Phi(\varphi)=\Theta e^{im\varphi}$ とすると

$$\frac{\Phi}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\Theta}{\partial\theta}\right)-\frac{\Theta}{\sin^2\theta}m^2\Phi+\ell(\ell+1)\Theta\Phi=0 \implies \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\Theta}{\partial\theta}\right)+\left\{\ell(\ell+1)-\frac{m^2}{\sin^2\theta}\right\}\Theta=0 \tag{2}$$

$x=\cos\theta,\ dx=-\sin\theta d\theta=-\sqrt{1-x^2}d\theta$ とおくと

$$\frac{d}{dx}\left\{(1-x^2)\frac{d\Theta}{dx}\right\}+\left\{\ell(\ell+1)-\frac{m^2}{1-x^2}\right\}\Theta=(1-x^2)\frac{d^2\Theta}{dx^2}-2x\frac{d\Theta}{dx}+\left\{\ell(\ell+1)-\frac{m^2}{1-x^2}\right\}\Theta=0 \tag{3}$$

これはルジャンドル陪関数が満たす方程式と同じ形なので $\Theta(\theta)=P_\ell^m(\cos\theta)$ である。$Y(\theta,\varphi)\propto P_\ell^m(\cos\theta)e^{im\varphi}$ の規格直交性から係数を考えると

$$\begin{aligned}
\int_0^{2\pi}d\varphi\int_0^{\pi}P_\ell^m e^{im\varphi}\{P_{\ell'}^{m'}e^{im'\varphi}\}^*\sin\theta d\theta &= \int_0^{2\pi}d\varphi\int_0^{\pi}P_\ell^m e^{im\varphi}\{P_{\ell'}^{m'}e^{im'\varphi}\}^*\sin\theta d\theta \\
&= \int_0^{2\pi}e^{i(m-m')\varphi}d\varphi\int_0^{\pi}P_\ell^m P_{\ell'}^{m'*}\sin\theta d\theta \\
&= 2\pi\delta_{mm'}\int_0^{\pi}P_\ell^m P_{\ell'}^{m'*}\sin\theta d\theta \underbrace{=}_{x=\cos\theta} 2\pi\delta_{mm'}\int_{-1}^{1}P_\ell^m P_{\ell'}^{m'}dx \\
&\underbrace{=}_{\text{ルジャンドル陪関数の直交性}} \frac{4\pi}{2\ell+1}\frac{(\ell+m)!}{(\ell-m)!}\delta_{mm'}\delta_{\ell\ell'}
\end{aligned}$$

より、(1) 式の解を

$$Y_\ell^m(\theta,\varphi)=(-1)^m\sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}\frac{(\ell-m)!}{(\ell+m)!}}P_\ell^m(\cos\theta)e^{im\varphi} \tag{4}$$

と書くことにする。これを球面調和関数と呼ぶ (教科書によって $(-1)^m$ の有無があり、定義の仕方が違う)。
球面調和関数のパリティ変換を考える。$\mathbf{r}\to-\mathbf{r}$ の変換、すなわち $\theta\to\pi-\theta,\phi\to\phi+\pi$ に対するこの関数の変換性を示そう。

$$\begin{aligned}
Y_\ell^m(\pi-\theta,\varphi+\pi) &= (-1)^m\sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}\frac{(\ell-m)!}{(\ell+m)!}}P_\ell^m(\underbrace{\cos(\pi-\theta)}_{=-\cos\theta})e^{im(\varphi+\pi)} \\
&\underbrace{=}_{\text{ルジャンドル陪関数のパリティ}} (-1)^m\sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}\frac{(\ell-m)!}{(\ell+m)!}}(-1)^{\ell+m}P_\ell^m(\cos\theta)e^{im\varphi}(-1)^m \\
&= (-1)^\ell(-1)^m\sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}\frac{(\ell-m)!}{(\ell+m)!}}P_\ell^m(\cos\theta)e^{im\varphi}=(-1)^\ell Y_\ell^m(\theta,\varphi) \qquad (5)
\end{aligned}$$

球面調和関数には加法定理が存在する。$\mathbf{x} = (\sin\theta\cos\varphi, \sin\theta\sin\varphi, \cos\theta), \mathbf{y} = (\sin\theta'\cos\varphi', \sin\theta'\sin\varphi', \cos\theta')$ とすると

$$\mathbf{x}\cdot\mathbf{y} = \sin\theta\sin\theta'\cos(\varphi-\varphi') + \cos\theta\cos\theta' \equiv \cos\alpha \tag{6}$$

ここで

$$P_\ell(\cos\alpha) = \sum_{m=-\ell}^{\ell} b_m(\theta', \varphi') Y_\ell^m(\theta, \varphi) \tag{7}$$

のように展開し、係数 b_m の方に θ', φ' の依存性を押し付ける。直交性より

$$b_m(\theta', \varphi') = \int_0^\pi d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi P_\ell(\cos\gamma) Y_\ell^m(\theta, \varphi)^* \sin\theta \tag{8}$$

ここで γ は適当な角度である。同様に

$$Y_\ell^{m*}(\theta, \varphi) = \sum_{m=-\ell}^{\ell} B_{mm'} Y_\ell^{m'}(\alpha, \beta) \tag{9}$$

ここで β も適当な角度である。直交性より

$$B_{mm'} = \int Y_\ell^{m*}(\theta, \varphi) Y_\ell^{m'*}(\alpha, \beta) d\Omega_{\alpha,\beta} \tag{10}$$

特に $m' = 0$ のとき

$$B_{m0} = \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}} \int Y_\ell^{m*}(\theta, \varphi) P_\ell^0(\cos\alpha) d\Omega_{\alpha,\beta} = \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}} \int Y_\ell^{m*}(\theta, \varphi) P_\ell(\cos\alpha) d\Omega_{\alpha,\beta} \tag{11}$$

この立体角積分は α, β での行うとしているが、全立体角で積分なので、θ, φ で全立体角積分しても結果は同じでならなければならない。

$$B_{m0} = \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}} \int_0^\pi d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi Y_\ell^{m*} P_\ell(\cos\alpha) \sin\theta \underbrace{=}_{(8)} \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}} b_m(\theta', \varphi') \tag{12}$$

$P_n^m = (1-z^2)^{m/2} \dfrac{d^m P_n}{dz^m}$ より、$P_n^m(1) = P_n^m(-1) = \delta_{m0}$。よって

$$Y_\ell^m(0, \beta) = (-1)^m \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi} \frac{(\ell-m)!}{(\ell+m)!}} P_\ell^m(1) e^{im\varphi} = (-1)^m \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi} \frac{(\ell-m)!}{(\ell+m)!}} \delta_{m0} e^{im\varphi} = \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}} \delta_{m0} \tag{13}$$

(9)式に$\alpha = 0$ を代入。

$$Y_\ell^{m*}(\theta, \varphi) = \sum_{m=-\ell}^{\ell} B_{mm'} \underbrace{Y_\ell^{m'}(0, \beta)}_{(13)} = \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}} B_{m0} \tag{14}$$

その定義より、α は $\mathbf{x}, \mathbf{y}$ の成す角である。よって $\alpha = 0$ は $\theta = \theta', \varphi = \varphi'$ を意味する。

$$Y_\ell^{m*}(\theta', \varphi') = \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}} B_{m0} \underbrace{=}_{(12)} \frac{2\ell+1}{4\pi} b_m(\theta', \varphi') \tag{15}$$

$$\therefore (7) \implies P_\ell(\cos\alpha) = P_\ell(\mathbf{x}\cdot\mathbf{y}) = \frac{4\pi}{2\ell+1} \sum_{m=-\ell}^{\ell} Y_\ell^{m*}(\theta', \varphi') Y_\ell^m(\theta, \varphi) \tag{16}$$

次にウンゼルトの定理を証明しよう。ルジャンドル関数の母関数展開 $(1-2\omega z+\omega^2)^{-1/2} = \sum P_n(z) z^n$ において $z=1$ を代入する。

$$\frac{1}{1-\omega} = \sum_{n=0}^{\infty} P_n(1)\omega^n \tag{17}$$

よって $P_n(z) = 1$ である。

$$\therefore \sum_{m=-\ell}^{\ell} Y_\ell^{m*}(\theta', \varphi') Y_\ell^m(\theta, \varphi) = \frac{2\ell+1}{4\pi} \tag{18}$$

可視化

球面調和関数は複素数なので、可視化が難しい。しかし、物理でよく用いられるのはその大きさであることが多い (例えば、量子力学の水素原子中の電子の確率分布など)。よってここでは球面調和関数の大きさを 3 次元空間内で可視化したものを示す。色が青や黒いところほど、値が小さい。

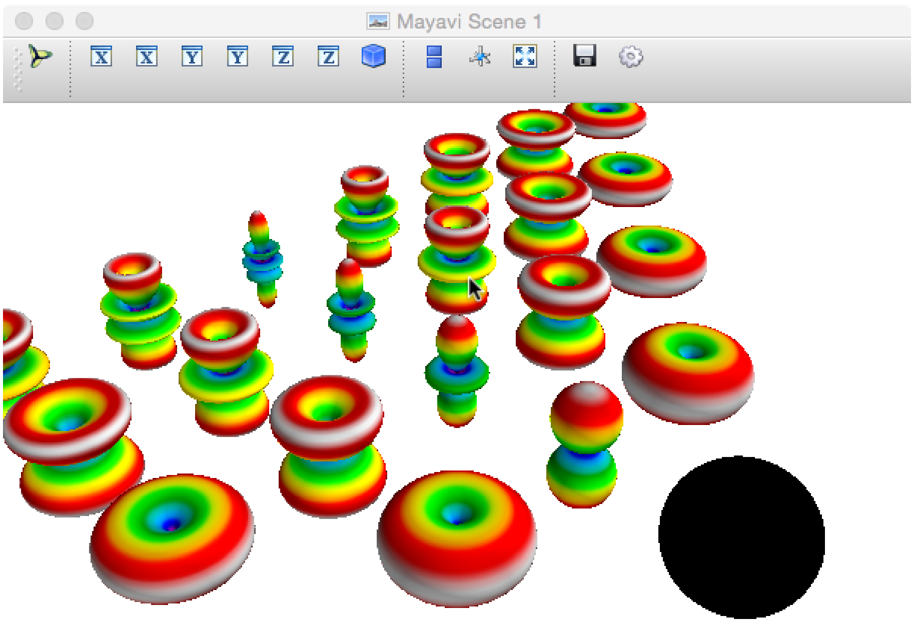

fig 1: Python から Mayavi を呼び出して可視化したもの。右下から順に $n = 0, 1, \ldots 4$ までを図示した。

Bibliography

[1] 田島 一郎, 近藤 次郎, "改訂演習工科の数学 4 複素関数", 培風館

[2] 中山 恒義, ”裳華房フィジックスライブラリー 物理数学 II”, 裳華房

[3] 福山 英敏, 小形 正男, ”基礎物理学シリーズ 3 物理数学 I”, 朝倉書店

[4] 東北大学理学部物理学科, 宇宙地球物理学科 波動論 (担当教官：柴田尚和) 授業プリント