

球面調和関数

[中心力問題、重力波]

量子力学の「中心力問題」、天体物理学の「重力波」(相対論的な重力波ではない)等では、極座標表示を用いた場合その角度に依存する偏微分方程式は、ヘルムホルツ方程式となり、その解は球面調和関数 $Y_l^m(\theta, \phi)$ で書けることが知られている。ここではそれらを確認し、球面調和関数を可視化することを考える。

1 中心力問題

量子力学の中心力問題を考える。主に波動関数の角度依存成分について考え、角運動量の方向量子化も取り上げる。

1.1 Schrödinger equation

Schrödinger equation

$$\mathcal{H}\psi_E(\mathbf{r}) = E\psi_E(\mathbf{r}) \quad (1)$$

を、球対称な中心力ポテンシャル $V(\mathbf{r}) = V(r)$ のもとで解く。このときハミルトニアン \mathcal{H} は、

$$\mathcal{H} = \hat{T} + \hat{V} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\mathbf{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right] + V(r) \quad (2)$$

と書ける。今の場合

$$\begin{cases} x &= r \sin \theta \cos \phi \\ y &= r \sin \theta \sin \phi \\ z &= r \cos \theta \end{cases} \quad (3)$$

ととり、量子化軸を z 軸としている。

1.2 解

球対称ポテンシャルは

$$\lim_{r \rightarrow \infty} r^2 V(r) \rightarrow 0 \quad (4)$$

を満たしているとする。

Eq.(2) を Eq.(1) に代入すると

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\psi_E}{\partial r}\right)\right] - \frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\psi_E}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2\psi_E}{\partial\phi^2}\right] + V(r)\psi_E = E\psi_E \quad (5)$$

を得る。

変数分離

$$\psi_E(\mathbf{r}) = \psi_E(r, \theta, \phi) = R(r)Y_l^m(\theta, \phi)Y_l^m(\theta, \phi) \quad : \text{球面調和関数} \quad (6)$$

とし、以下のように角度に依存する成分と、動経方向の成分について考える。

1.2.1 角度に依存する成分

Eq.(6) を Eq.(5) に代入し整理すると、角度依存成分の方程式として

$$-\left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right] Y_l^m(\theta, \phi) = l(l+1) Y_l^m(\theta, \phi) \quad (7)$$

を得る。今

$$\nabla_{\theta, \phi}^2 \equiv \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right] \quad (8)$$

と定義すると、上の方程式は

$$-\nabla_{\theta, \phi}^2 Y_l^m(\theta, \phi) = l(l+1) Y_l^m(\theta, \phi) \quad (9)$$

と書くことができる。これは確かにヘルムホルツ方程式になっている。

角運動量演算子

$$\hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}} = -i\hbar(\mathbf{r} \times \nabla) \quad (10)$$

を用いると、

$$\hat{\mathbf{L}}^2 = -\hbar^2 \nabla_{\theta, \phi}^2 \quad (11)$$

と書けるので、角運動量の二乗についての固有値方程式

$$\hat{\mathbf{L}}^2 Y_l^m(\theta, \phi) = \hbar^2 l(l+1) Y_l^m(\theta, \phi) = L^2 Y_l^m(\theta, \phi) \quad (12)$$

を得る。このとき

$$-l \leq m \leq +l, \quad m = 0, 1, 2, \dots \quad l = 0, 1, 2, \dots \quad (13)$$

である。

座標を Eq.(3) の様にとり、今量子化軸を z 軸としているので（量子化軸は問題に応じて任意にとることができる。z 軸だけが特別であるわけではない）、角運動量演算子 $\hat{\mathbf{L}}$ の z 成分 \hat{L}_z は

$$\hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi} \quad (14)$$

と書ける。このとき

$$-i \frac{\partial}{\partial \phi} Y_l^m(\theta, \phi) = m Y_l^m(\theta, \phi) \quad (15)$$

であるから、

$$\hat{L}_z Y_l^m(\theta, \phi) = \hbar m Y_l^m(\theta, \phi) \quad (16)$$

となり、角運動量の z 成分についての固有値方程式を得る。

1.2.2 動経方向の成分

動経方向を求めるために更に、

$$u_E(r) = rR(r) \quad (17)$$

を定義する。これを Eq.(5) に代入し、整理すると動経方向の方程式として次元問題の方程式と同等な、

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u_E(r)}{dr^2} + \left[V(r) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} u_E(r) = E u_E(r) \right] \quad (18)$$

を得る。これを境界条件

$$u_E(r)|_{r=0} = 0 \quad (19)$$

のもとで解くことになる。

1.3 方向量子化 (quantization of direction)

角運動量に関する固有値方程式 Eq.(12),(16) から、角運動量の大きさとその z 成分を、同時に正確に測定することができることが分かる。

Eq.(3) より \hat{L}_x, \hat{L}_y は

$$\hat{L}_x = i\hbar \left(\sin\phi \frac{\partial}{\partial\theta} + \cot\theta \cos\phi \frac{\partial}{\partial\phi} \right), \quad \hat{L}_y = i\hbar \left(-\cos\phi \frac{\partial}{\partial\theta} + \cot\theta \sin\phi \frac{\partial}{\partial\phi} \right) \quad (20)$$

と書けるので、 $Y_l^m(\theta, \phi)$ は \hat{L}_x や \hat{L}_y の固有関数にはなっていない。従って、角運動量の x 成分や y 成分を、この状態において正確に測定することはできない。

角運動量はその大きさも z 成分も、共に離散スペクトルになっていることが固有値方程式 Eq.(12),(16) から分かり、特に

$$L = \hbar \sqrt{l(l+1)} \quad (21)$$

の大きさの角運動量ベクトルの z 成分が、 $2l+1$ 個の飛び飛びの値 $L_z = \hbar m$ をとることが分かる。角運動量と z 軸との間の角度は

$$\cos\theta = \frac{m}{\sqrt{l(l+1)}} \quad (22)$$

という決まった値しかとることができない。この現象を方向量子化 (**quantization of direction**) と呼ぶ。これはつまり角運動量の z 成分が量子化されたという意味である。

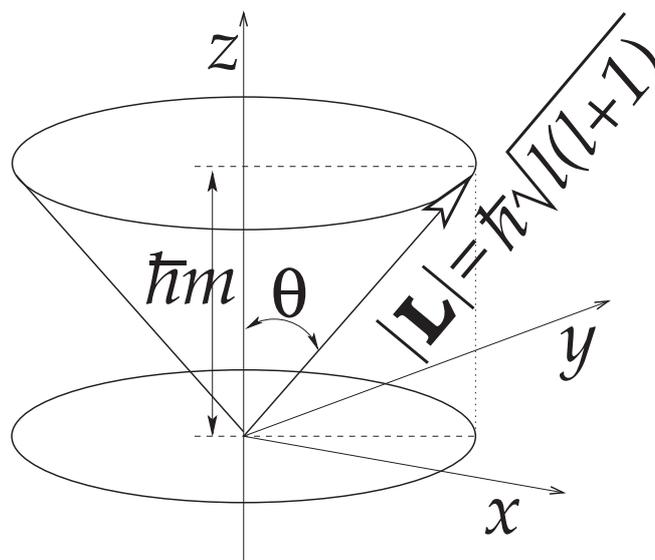


図1 角運動量ベクトルは図の円錐に沿って歳差運動をしており、 x 成分や y 成分は測定毎に異なる値をとる。

球面調和関数で記述できるある状態 $Y_l^m(\theta, \phi)$ では、角運動量の大きさと z 軸との間の角は変化しない(同時測定可能であるから、ある決まった値をとることができる。)。しかし、角運動量の x, y 成分については同時測定可能でないために一意に決めることができず、 L_x, L_y の値は不確定となる。このとき角運動量ベクトルは z 軸の回りを歳差運動することになる。

2 重力波

天体物理学の重力波 (gravity wave) を考える (相対論的な重力波 gravitational wave ではない)。

2.1 方程式

重力加速度 g が動経方向 \mathbf{e}_r の負の方向に働いており、密度、圧力が動経方向正の向きに向かって減少している様な平衡状態を考える。流体の方程式は連続の式、運動方程式で

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0 \quad (23)$$

$$\rho \left[\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} \right] = -\nabla p - g\rho \mathbf{e}_r \quad (24)$$

と書くことができる。ある場所で平衡状態にある物理量について添え字を零、平衡状態からの摂動を添え字を添えて表すと、

$$p(\mathbf{r}) = p_0(r) + p_1(\mathbf{r}), \quad \rho(\mathbf{r}) = \rho_0(r) + \rho_1(\mathbf{r}), \quad \mathbf{v}(\mathbf{r}) = \mathbf{v}_0(r) + \mathbf{v}_1(\mathbf{r}) = \mathbf{v}_1(\mathbf{r}) \quad (25)$$

このように、場所を固定して平衡点からの差をとったものを **Eulerian perturbations** という。Eq.(25) を Eq.(23),(24) に代入し、摂動の二次以上の項を無視すると、

$$\frac{\partial \rho_1}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_0 \mathbf{v}_1) = 0 \quad (26)$$

$$\rho_0 \frac{\partial \mathbf{v}_1}{\partial t} = -\nabla p_1 - g\rho_1 \mathbf{e}_r \quad (27)$$

が得られる。

摂動による平衡点からのずれを

$$\boldsymbol{\xi} = \mathbf{r} - \mathbf{r}_0 \quad (28)$$

と書く。今断熱摂動を仮定すると、Eulerian perturbation に対する断熱関係は

$$p_1^2 - c_s^2 \rho_1 = \xi_r \left(c_s^2 \frac{d\rho_0}{dr} - \frac{dp_0}{dr} \right) \quad c_s : \text{音速} \quad (29)$$

と書けるが、摂動によって生じる速度場 \mathbf{v}_1 が

$$\mathbf{v}_1 = \frac{d\boldsymbol{\xi}}{dt} \quad (30)$$

で与えられることを考えると、Eq.(26),(27),(29) より与えられた平衡状態に対して摂動量を解くことができる。

2.2 Acoustic-Gravity Wave

Eq.(26),(27),(29) で \mathbf{v}_1 を Eq.(30) におきかえ、時間依存性は

$$\exp(i\omega t) \quad (31)$$

であることを使うと、式は

$$\rho_1 = -\nabla \cdot (\rho_0 \boldsymbol{\xi}) \quad (32)$$

$$\omega^2 \rho_0 \boldsymbol{\xi} = \nabla p_1 + \rho_1 g \mathbf{e}_r \quad (33)$$

$$\rho_1 = \frac{p_1}{c_s^2} + \xi_r \left[\left(\frac{d\rho_0}{dr} \right)_{\text{ad}} - \frac{d\rho_0}{dr} \right] = \frac{p_1}{c_s^2} + \frac{\rho_0 N^2}{g} \xi_r \quad (34)$$

となる、ここで、 N は

$$N^2 \equiv \frac{g}{\rho_0} \left[\left(\frac{d\rho_0}{dr} \right)_{\text{ad}} - \frac{d\rho_0}{dr} \right] \quad \text{:Brunt-Väisälä frequency} \quad (35)$$

である。

2.3 解

振動が球構造の場合を考える。このとき一般に g, c_s, N は r の関数である。

Eq.(33) を成分で書き下すと

$$\omega^2 \rho_0 \xi_r = \frac{\partial p_1}{\partial r} + \rho_1 g, \quad \omega^2 \rho_0 \xi_\theta = \frac{1}{r} \frac{\partial p_1}{\partial \theta}, \quad \omega^2 \rho_0 \xi_\phi = \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial p_1}{\partial \phi} \quad (36)$$

となる。Eq.(33) の divergence をとり、Eq.(36) を用いると

$$\omega^2 \nabla \cdot (\rho_0 \xi) = \nabla^2 p_1 + \nabla \cdot (g \rho_1 \mathbf{e}_r) \implies \nabla^2 p_1 + \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (g r^2 \rho_1) + \omega^2 \rho_1 = 0 \quad (37)$$

を得る。更に Eq.(36) を用い Eq.(34) を整理すると、

$$\begin{aligned} \rho_1 &= \frac{p_1}{c_s^2} + \frac{N^2}{g} \rho_0 \xi_r = \frac{p_1}{c_s^2} + \frac{N^2}{g \omega^2} \left(\frac{\partial p_1}{\partial r} + \rho_1 g \right) = \frac{p_1}{c_s^2} + \frac{N^2}{g \omega^2} \frac{\partial p_1}{\partial r} + \frac{N^2}{\omega^2} \rho_1 \\ \therefore \frac{\omega^2 - N^2}{\omega^2} \rho_1 &= \frac{p_1}{c_s^2} + \frac{N^2}{g \omega^2} \frac{\partial p_1}{\partial r}, \quad \rho_1 = \frac{\omega^2}{\omega^2 - N^2} \frac{p_1}{c_s^2} + \frac{N^2}{(\omega^2 - N^2)g} \frac{\partial p_1}{\partial r} \end{aligned} \quad (38)$$

となる。Eq.(37),(38) より、 p_1 についての偏微分方程式

$$\nabla^2 p_1 + \frac{\omega^4}{\omega^2 - N^2} \frac{p_1}{c_s^2} + \frac{\omega^2 N^2}{(\omega^2 - N^2)g} \frac{\partial p_1}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left[\left(\frac{g \omega^2}{\omega^2 - N^2} r^2 \right) \left(\frac{1}{c_s^2} + \frac{N^2}{g \omega^2} \frac{\partial}{\partial r} \right) p_1 \right] = 0 \quad (39)$$

が得られる。

今、球面調和関数を用い変数分離 $p_1 = R(r) Y_l^m(\theta, \phi)$ とし、

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right] = \frac{1}{r^2} (\nabla_r^2 + \nabla_{\theta, \phi}^2) \quad (40)$$

と書くと、Eq.(39) は

$$R(r) \nabla_{\theta, \phi}^2 Y_l^m(\theta, \phi) + Y_l^m(\theta, \phi) \nabla_r^2 R(r) + \lambda(r) R(r) Y_l^m(\theta, \phi) + X(r) = 0$$

となり、両辺を $R(r) Y_l^m(\theta, \phi)$ で割り、整理すると、

$$\frac{1}{Y_l^m(\theta, \phi)} \nabla_{\theta, \phi}^2 Y_l^m(\theta, \phi) = - \left[\frac{1}{R(r)} \nabla_r^2 R(r) + \tilde{\lambda}(r) + \tilde{X}(r) \right] = \text{Const} = -C$$

$$\therefore \nabla_{\theta, \phi}^2 Y_l^m(\theta, \phi) + C Y_l^m(\theta, \phi) = 0 \quad (41)$$

$$\nabla_r^2 R(r) - C [\tilde{\lambda}(r) + \tilde{X}(r)] = 0 \quad (42)$$

となる。角度に依存する微分方程式は確かにヘルムホルツ方程式である。

p_1 の角度依存成分が球面調和関数に比例するので、Eq.(36) より、

$$\rho_1 \propto \rho_1(\theta, \phi) \propto Y_l^m(\theta, \phi), \quad \xi_r \propto \xi_r(\theta, \phi) \propto Y_l^m(\theta, \phi) \quad (43)$$

また

$$\xi_\theta \propto \xi_\theta(\theta, \phi) \propto \frac{\partial Y_l^m(\theta, \phi)}{\partial \theta} = C_1(l+m)Y_{l-1}^m(\theta, \phi) \csc \theta + C_2 l Y_l^m(\theta, \phi) \cot \theta \quad (44)$$

$$\xi_\phi \propto \xi_\phi(\theta, \phi) \propto \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial Y_l^m(\theta, \phi)}{\partial \phi} = \frac{im}{\sin \theta} Y_l^m(\theta, \phi) \quad (45)$$

となることが分かる。

3 球面調和関数 (Spherical Harmonic)

3.1 基本的な性質

以下に球面調和関数 $Y_l^m(\theta, \phi)$ の性質を挙げておく。

$$Y_l^m(\theta, \phi) = (-1)^m \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} P_l^m(\cos \theta) e^{im\phi}, \quad (m \geq 0) \quad (46)$$

$$Y_l^m(\theta, \phi) = (-1)^{|m|} Y_l^{|m|*}(\theta, \phi), \quad (m < 0) \quad (47)$$

$$P_l^m(\cos \theta) = (1 - \cos^2 \theta)^{m/2} \frac{d^m}{d(\cos \theta)^m} P_l(\cos \theta), \quad (m \geq 0) \quad (48)$$

$$P_l(\cos \theta) = \frac{(-1)^l}{2^l l!} \frac{d^l}{d(\cos \theta)^l} (1 - \cos^2 \theta)^l, \quad (49)$$

$$\int Y_l^{m'*}(\theta, \phi) Y_l^m(\theta, \phi) d\Omega = \delta_{ll'} \delta_{mm'} \quad (50)$$

$$Y_0^0(\theta, \phi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}, \quad Y_1^0(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta, \quad Y_1^{\pm 1}(\theta, \phi) = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{\pm im\phi}$$

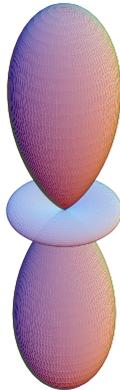
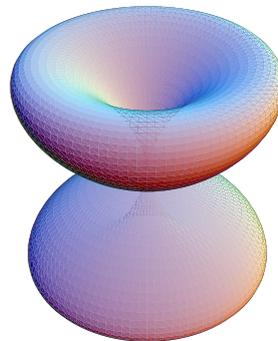
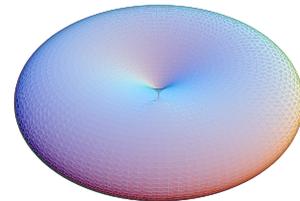
$$Y_2^0(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3 \cos^2 \theta - 1), \quad Y_2^{\pm 1}(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{15}{8\pi}} (\sin \theta \cos \theta) e^{\pm i\phi}, \quad Y_2^{\pm 2}(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} (\sin^2 \theta) e^{\pm 2i\phi}$$

3.2 球面調和関数の可視化

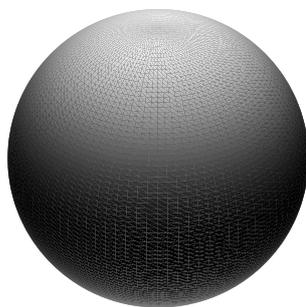
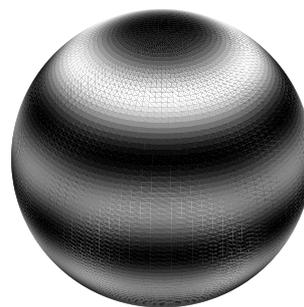
中心力の問題では波動関数の角度依存成分が、重力波では密度、圧力の摂動量、流体摂動の変位速度が球面調和関数に比例する。そこで $|Y_l^m(\theta, \phi)|^2$, $|Y_l^m(\theta, \phi)|$, $\text{Re}[Y_l^m(\theta, \phi)]$ を可視化してみる。

$|Y_l^m(\theta, \phi)|^2$ は原点から球面までの距離が球面調和関数の絶対値の二乗を表しており、 $|Y_l^m(\theta, \phi)|$, $\text{Re}[Y_l^m(\theta, \phi)]$ は球面上の濃淡 (白の場所で値が大きく、黒の場所では値が小さい) で表している。

3.2.1 原点からの距離が球面調和関数の絶対値の二乗を表すプロット

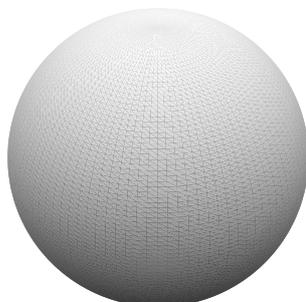
 $l=2, m=0$  $l=2, m=1$  $l=2, m=2$ 

3.2.2 球面調和関数の絶対値を球面上の濃淡でプロット

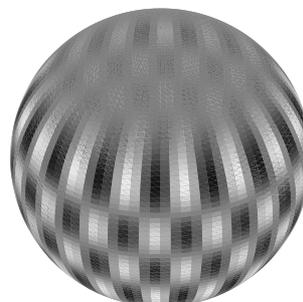
 $l=1, m=0$  $l=5, m=2$ 

3.2.3 球面調和関数の実部の値を球面上の濃淡でプロット

l=1,m=0



l=20,m=17



PDF のサイズ軽減のため図の数を少なくしている。更なる図については **HTML** 版を参照。

3.3 可視化について

可視化には Mathematica を用いた。今回用いた関数を以下に挙げておく。

3.3.1 共通

```
x[theta_, phi_] := Cos[phi] Sin[theta] ;
```

```
y[theta_, phi_] := Sin[phi] Sin[theta] ;
```

```
z[theta_, phi_] := Cos[theta];
```

```
findmaxSphericalharmonic[l_, m_] := First[
  NMaximize[Abs[SphericalHarmonicY[l, m, theta, phi]] , {theta, phi}]
];
```

3.3.2 原点からの距離が球面調和関数の絶対値の二乗を表すプロット

```
lengthplotSphericalHarmonic[l_, m_] := ParametricPlot3D[
  {Abs[ SphericalHarmonicY[l, m, theta, phi] ]^2 x[theta, phi],
   Abs[ SphericalHarmonicY[l, m, theta, phi] ]^2 y[theta, phi],
   Abs[ SphericalHarmonicY[l, m, theta, phi] ]^2 z[theta, phi],
   EdgeForm[]
  }
,
  {theta, 0, Pi},
  {phi, 0, 2 Pi}
,
  ;
```

```

PlotPoints -> 100,
Boxed -> False,
Axes -> None,
PlotLabel -> SequenceForm["l=", l, ",m=", m]
]

```

3.3.3 球面調和関数の絶対値を球面上の濃淡でプロット

```

plotSphericalHarmonic[l_, m_] := Block[{saidai},
saidai = findmaxSphericalharmonic[l, m];
ParametricPlot3D[
{x[theta, phi],
y[theta, phi],
z[theta, phi],
{
EdgeForm[],
GrayLevel[
(Abs[SphericalHarmonicY[l, m, theta, phi])/saidai]^2
]
}
},
{phi, 0, 2Pi}, {theta, 0, Pi},
Lighting -> False,
Boxed -> False,
Axes -> None,
PlotPoints -> 100,
PlotLabel -> SequenceForm["l=", l, ",m=", m]
]]

```

3.3.4 球面調和関数の実部の値を球面上の濃淡でプロット

```

replotSphericalHarmonic[l_, m_] := Block[{saidai},
saidai = findmaxSphericalharmonic[l, m];
ParametricPlot3D[
{x[theta, phi],
y[theta, phi],
z[theta, phi],
{
EdgeForm[],
GrayLevel[
(Re[SphericalHarmonicY[l, m, theta, phi]] + saidai)/(2 saidai)
]
}
},

```

```
{phi, 0, 2Pi}, {theta, 0, Pi},  
Lighting -> False,  
Boxed -> False,  
PlotPoints -> 100,  
Axes -> False,  
PlotLabel -> SequenceForm["l=", l, ",m=", m]  
]]
```