Kubic (Cubic) Harmonics

Masahiro Yamamoto

June 27, 2023

1 定義

球面調和関数 $Y_{l,\pm m}(\theta,\phi)$ は以下のように定義される。[1]

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

$$\frac{m+|m|}{2} = \begin{cases} m & m>0 \\ 0 & m=0 \\ 0 & m<0 \end{cases} \tag{2}$$

この定義を使うと，$m>0$ の時

$$Y^*_{l,m}(\theta,\phi) = (-1)^{\frac{m+|m|}{2}}\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}\frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}}P_l^{|m|}(\cos\theta)e^{-im\phi} \tag{3}$$

$$= (-1)^m Y_{l,-m}(\theta,\phi) \tag{4}$$

$m \le 0$ の時

$$Y^*_{l,m}(\theta,\phi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}\frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}}P_l^{|m|}(\cos\theta)e^{-im\phi} \tag{5}$$

$$= (-1)^m Y_{l,-m}(\theta,\phi) \tag{6}$$

従って，すべての m に対して

$$Y^*_{l,m}(\theta,\phi) = (-1)^m Y_{l,-m}(\theta,\phi) \tag{7}$$

ルジャンドル陪関数 $P_l^m(X)$ の代表例は

$$P_0^0(X) = 1 \tag{8}$$

$$P_1^0(X) = X = \cos\theta,\ P_1^1(X) = (1-X^2)^{1/2} = \sin\theta \tag{9}$$

$$P_2^0(X) = \frac{1}{2}(3X^2-1) = \frac{1}{2}(3\cos^2\theta-1),\ P_2^1(X) = 3X(1-X^2)^{1/2} = 3\cos\theta\sin\theta, P_2^2(X) = 3(1-X^2) = 3\sin^2\theta \tag{10}$$

従って，代表的な球面調和関数の具体例として

$$
\begin{aligned}
Y_{0,0}(\theta,\phi) &= \frac{1}{\sqrt{4\pi}},\ Y_{0,0}(x,y,z) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} && (11)\\
Y_{1,0}(\theta,\phi) &= \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta,\ Y_{1,0}(x,y,z) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\frac{z}{r} && (12)\\
Y_{1,\pm1}(\theta,\phi) &= \mp\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta e^{\pm i\phi},\ Y_{1,\pm1}(x,y,z) = \mp\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\frac{x\pm iy}{r} && (13)\\
Y_{2,0}(\theta,\phi) &= \sqrt{\frac{5}{16\pi}}(3\cos^2\theta-1),\ Y_{2,0}(x,y,z) = \sqrt{\frac{5}{16\pi}}\frac{3z^2-r^2}{r^2} && (14)\\
Y_{2,\pm1}(\theta,\phi) &= \mp\sqrt{\frac{15}{8\pi}}\sin\theta\cos\theta e^{\pm i\phi},\ Y_{2,\pm1}(x,y,z) = \mp\sqrt{\frac{15}{8\pi}}\frac{(x\pm iy)z}{r} && (15)\\
Y_{2,\pm2}(\theta,\phi) &= \sqrt{\frac{15}{32\pi}}\sin^2\theta e^{\pm 2i\phi},\ Y_{2,\pm2}(x,y,z) = \sqrt{\frac{15}{32\pi}}\frac{(x^2-y^2\pm 2ixy)}{r^2} && (16)\\
& && (17)
\end{aligned}
$$

これらの球面調和関数 (Spherical Harmonic function) は $e^{im\phi}$ のように複素数を含むため，実数化した方が波動関数の表示および計算に便利である。そこで，以下のように **Kubic**(あるいは **Cubic**) **Harmonic function** (日本語訳は今のところみあたらない)$K_{lm}(\theta,\phi)$ あるいは $K_{lm}(x,y,z)$ を定義する。[1]

$m>0$ に対して

$$
\begin{aligned}
K_{l,m} &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(Y_{l,m}+Y^*_{l,m}\right) && (18)\\
K_{l,-m} &= \frac{-i}{\sqrt{2}}\left(Y_{l,m}-Y^*_{l,m}\right) && (19)
\end{aligned}
$$

$m=0$ に対して，

$$
K_{l,0} = Y_{l,0} \tag{20}
$$

で定義する。

具体的には，

$$K_{0,0} = Y_{0,0} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \tag{21}$$

$$K_{1,0} = Y_{1,0} = \frac{3}{\sqrt{4\pi}}\cos\theta = \frac{3}{\sqrt{4\pi}}\frac{z}{r} \tag{22}$$

$$K_{1,1} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(Y_{1,1} + Y_{1,1}^*\right) = -\frac{1}{\sqrt{2}}\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta(e^{i\phi} + e^{-i\phi}) = -\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\sin\theta\cos\phi = -\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\frac{x}{r} \tag{23}$$

$$K_{1,-1} = \frac{-i}{\sqrt{2}}\left(Y_{1,1} - Y_{1,1}^*\right) = \frac{-i}{\sqrt{2}}(-\sqrt{\frac{3}{8\pi}})\sin\theta(e^{i\phi} - e^{-i\phi}) = -\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\sin\theta\sin\phi = -\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\frac{y}{r} \tag{24}$$

$$K_{2,0} = Y_{2,0} = \sqrt{\frac{5}{16\pi}}(3\cos^2\theta - 1) = \sqrt{\frac{5}{16\pi}}\frac{3z^2 - r^2}{r^2} \tag{25}$$

$$K_{2,2} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(Y_{2,2} + Y_{2,2}^*\right) = \frac{1}{\sqrt{2}}\sqrt{\frac{15}{32\pi}}\sin^2\theta(e^{2i\phi} + e^{-2i\phi}) = \sqrt{\frac{15}{16\pi}}\sin^2\theta\underbrace{\cos(2\phi)}_{=\cos^2\phi - \sin^2\phi} = \sqrt{\frac{15}{16\pi}}\frac{x^2 - y^2}{r^2} \tag{26}$$

$$K_{2,-2} = \frac{-i}{\sqrt{2}}\left(Y_{2,2} - Y_{2,2}^*\right) = \frac{-i}{\sqrt{2}}\sqrt{\frac{15}{32\pi}}\sin^2\theta(e^{2i\phi} - e^{-2i\phi}) = \frac{2}{\sqrt{2}}\sqrt{\frac{15}{32\pi}}\sin^2\theta\underbrace{\sin(2\phi)}_{=2\cos\phi\sin\phi} = \sqrt{\frac{15}{4\pi}}\frac{xy}{r^2} \tag{27}$$

$$K_{2,1} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(Y_{2,1} + Y_{2,1}^*\right) = -\frac{1}{\sqrt{2}}\sqrt{\frac{15}{8\pi}}\sin\theta\cos\theta(e^{i\phi} + e^{-i\phi}) = -\sqrt{\frac{15}{4\pi}}\sin\theta\cos\theta\cos\phi = -\sqrt{\frac{15}{4\pi}}\frac{xz}{r^2} \tag{28}$$

$$K_{2,-1} = \frac{-i}{\sqrt{2}}\left(Y_{2,1} - Y_{2,1}^*\right) = -\frac{-i}{\sqrt{2}}\sqrt{\frac{15}{8\pi}}\sin\theta\cos\theta(e^{i\phi} - e^{-i\phi}) = -\sqrt{\frac{15}{4\pi}}\sin\theta\cos\theta\sin\phi = -\sqrt{\frac{15}{4\pi}}\frac{yz}{r^2} \tag{29}$$

となる。

従って，Kubic Harmonic functon は，よく知られた

$$K_{0,0} \Leftrightarrow s \tag{30}$$

$$K_{1,0} \Leftrightarrow p_z \tag{31}$$

$$K_{1,1} \Leftrightarrow p_x \tag{32}$$

$$K_{1,-1} \Leftrightarrow p_y \tag{33}$$

$$K_{2,0} \Leftrightarrow d_{z^2} \tag{34}$$

$$K_{2,2} \Leftrightarrow d_{x^2-y^2} \tag{35}$$

$$K_{2,1} \Leftrightarrow d_{xz} \tag{36}$$

$$K_{2,-1} \Leftrightarrow d_{yz} \tag{37}$$

$$K_{2,-2} \Leftrightarrow d_{xy} \tag{38}$$

軌道に対応することが明らかである。

References

[1] M. T. Hutchings, in *Solid State Physics*, edited by F. Seitz and D. Turnbull (Academic Press, New York, 1964), vol. 16, pp. 227 – 273.