第 VI 部
付録

A　ヘルムホルツ方程式の極座標での変数分離

ヘルムホルツ方程式

$$\Delta u + k^2 u = 0$$

を考える。極座標

$$x = r\sin\theta\cos\phi,\quad y = r\sin\theta\sin\phi,\quad x = r\cos\theta$$

として

$$\begin{aligned}
\Delta_{3D} &= \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \\
&= \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2} \\
\Delta_{2D} &= \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \\
&= \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}
\end{aligned}$$

よって 3 次元において

$$u(r,\theta,\phi) = R(r)\Theta(\theta)\Phi(\phi)$$

としたとき

$$\begin{aligned}
\Delta u + k^2 u &= \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \\
&= \frac{1}{r^2}\frac{\partial R}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)\Theta\Phi + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\Theta}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2\Phi}{\partial\phi^2} + k^2 R\Theta\Phi = 0
\end{aligned}$$

$$\sin^2\theta\left(\frac{\frac{d}{dr}\big(r^2\frac{dR}{dr}\big)}{R} + k^2r^2\right) + \sin\theta\frac{\frac{d}{d\theta}\big(\sin\theta\frac{d\Theta}{d\theta}\big)}{\Theta} = -\frac{1}{\Phi}\frac{d^2\Phi}{d\phi^2}$$

独立変数を考えて

$$\frac{1}{\Phi}\frac{d^2\Phi}{d\phi^2} = -\mu^2 = (\text{定数})$$

$$\frac{\frac{d}{dr}\big(r^2\frac{dR}{dr}\big)}{R} + k^2r^2 = -\frac{1}{\sin\theta}\frac{\frac{d}{d\theta}\big(\sin\theta\frac{d\Theta}{d\theta}\big)}{\Theta} + \frac{\mu^2}{\sin^2\theta}$$

よって両辺を定数 λ として

$$\begin{aligned}\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\big(r^2\frac{dR}{dr}\big)+\big(k^2-\frac{\lambda}{r^2}\big)R &= 0\\ \frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\big(\sin\theta\frac{d\Theta}{d\theta}\big)+\big(\lambda-\frac{\mu^2}{\sin^2\theta}\big)\Theta &= 0\end{aligned}$$

まず Φ に関しては $\Phi(\phi)=e^{i\mu\phi}$ で一価性より $\mu=m=$ 整数

$$\Phi(\phi)=e^{i\mu\phi},\quad m=\cdots,-2,-1,0,1,2,\cdots$$

次に Θ については $x=\cos\theta$ として

$$\frac{d}{d\theta}=\frac{dx}{d\theta}\frac{d}{dx}=-\sin\theta\frac{d}{dx}$$

より

$$\begin{aligned}\frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\big(\sin\theta\frac{d\Theta}{d\theta}\big) &= \frac{d}{dx}\left(\sin^2\theta\frac{d\Theta}{dx}\right)\\ &= \frac{d}{dx}\left((1-x^2)\frac{d\Theta}{dx}\right)\end{aligned}$$

よって

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

これは Legendre の陪微分方程式と呼ばれ Strum-Liouville 型の方程式

$$\frac{d}{dx}\big(p(x)\frac{du}{dx}\big)+(\lambda\rho(x)-q(x))u=0$$

である。そのうち

$$\lambda=\ell(\ell+1),\quad \ell=0,1,2,\cdots$$

の時 $x=\pm1$ で有界な解が存在しそれを $P_\ell^m(x)$ と書き第一種の Legendre 陪関数という。

B　球関数

B.1　Legendre の微分方程式

$$\begin{aligned}\frac{d}{dx}\left[(1-x^2)\frac{dP_\ell}{dx}\right]+\lambda P_\ell &= \frac{d}{dx}\left[(1-x^2)\frac{dP_\ell}{dx}\right]+\ell(\ell+1)P_\ell\\ &= (1-x^2)P_\ell''-2xP_\ell'+\ell(\ell+1)P_\ell=0\end{aligned}$$

をルジャンドルの微分方程式といい, その閉区間 $[-1,1]$ で有界な解は $\ell=0,1,2,3,\cdots$ の時のみであり、そのとき解は多項式となりルジャンドル多項式と呼ばれる。この多項式は以下の性質を持つ。

$$\begin{aligned}
P_\ell(x) &= \sum_{n=0}^{\ell} C_n x^n, \ \left(C_n = \prod_{j=0}^{n-1} \frac{\ell(\ell+1)-j(j+1)}{2(j+1)^2}\right) \\
&= \frac{1}{2^\ell \ell!}\frac{d^\ell}{dx^\ell}(x^2-1)^\ell \\
P_0(x) &= 1 \\
P_1(x) &= x \\
P_2(x) &= \frac{3}{2}x^2 - \frac{1}{2} \\
&\vdots \\
\int_{-1}^{1} dx P_{\ell'}(x) P_\ell(x) &= \delta_{\ell\ell'}\frac{2}{2\ell+1}
\end{aligned}$$

また母関数展開と言われる次の展開式が成り立つ。

$$\frac{1}{|\vec{r}-\vec{r'}|} = \sum_{\ell=0}^{\infty} P_\ell(\cos\theta)\frac{1}{r_>}\left(\frac{r_<}{r_>}\right)^\ell$$

B.2 Legendre の陪微分方程式

$$\left\{(1-x^2)\frac{dP_\ell^m}{dx}\right\} + \left(\ell(\ell+1) - \frac{m^2}{1-x^2}\right)P_\ell^m = 0$$

をルジャンドルの陪微分方程式というがその解はルジャンドルの微分方程式の解 $P_\ell(x)$ から

$$P_\ell^m(x) = (1-x^2)^{\frac{m}{2}}\frac{d^m}{dx^m}P_\ell(x)$$

として得られる。これらは次の直交関係を満たす。

$$\int_{-1}^{1} dx P_\ell^m(x) P_{\ell'}^m(x) = \delta_{\ell\ell'}\frac{2}{2\ell+1}\frac{(\ell+m)!}{(\ell-m)!}$$

B.3 球関数

ここで球関数 $Y_{\ell m}$ を次のように定義する。

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

これらは次のいくつかの関係式をみたす。

- 規格直交性

$$\langle Y_{\ell' m'} | Y_{\ell m} \rangle \equiv \int d\Omega Y^*_{\ell' m'}(\theta, \phi) Y_{\ell m}(\theta, \phi) = \delta_{\ell, \ell'} \delta_{mm'}$$

- 昇降演算子の作用

$$L_{\pm} Y_{\ell m} = \hbar \sqrt{(\ell \mp m)(\ell \pm +1)} Y_{\ell m \pm 1}$$

- 加法定理

$$Y_{\ell m=0}(\cos 0) Y_{\ell m=0}(\omega) = \sum_{m=-\ell}^{\ell} Y^*_{\ell m}(\theta', \phi') Y_{\ell m}(\theta, \phi)$$

  ここで ω は (θ, ϕ) 方向と (θ', ϕ') 方向のなす角であり

$$\cos\omega = \cos\theta \cos\theta' + \sin\theta \sin\theta' \cos(\phi - phi')$$

  が成り立つ。

これを書き直すと

$$\begin{aligned} P_\ell(\cos\omega) &= P_\ell(\cos\theta) P_\ell(\cos\theta') + 2 \sum_{m=1}^{\ell} \frac{(\ell - m)!}{(\ell + m)!} P_\ell^m(\cos\theta) P_\ell^m(\cos\theta') \cos m(\phi - \phi') \\ &= \frac{4\pi}{2\ell + 1} \sum_m Y^*_{\ell m}(\theta', \phi') Y_{\ell m}(\theta, \phi) \end{aligned}$$

となる。

C　球ベッセル関数

C.1　球ベッセル関数

球ベッセル方程式

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

は 2 つの独立な解をもちそれらは、原点で正則な解 (球ベッセル関数) $j_\ell(x)$ と非正則な解 (球ノイマン関数) $n_\ell(x)$ と呼ばれ具体的に次のように書ける。

$$\begin{aligned} j_\ell(x) &= (-x)^\ell \left(\frac{1}{x} \frac{d}{dx} \right)^\ell \left(\frac{\sin x}{x} \right) \xrightarrow{x \to 0} \frac{x^\ell}{(2\ell+1)!!} \\ n_\ell(x) &= -(-x)^\ell \left(\frac{1}{x} \frac{d}{dx} \right)^\ell \left(\frac{\cos x}{x} \right) \xrightarrow{x \to 0} -\frac{(2\ell-1)!!}{x^{\ell+1}} \end{aligned}$$

また場合によっては第一種, 第二種ハンケル関数を

$$
\begin{aligned}
h_\ell^{(1)}(x) &= j_\ell(x) + i n_\ell(x) \\
h_\ell^{(2)}(x) &= j_\ell(x) - i n_\ell(x)
\end{aligned}
$$

と定義し、独立な２解とすることもある。特にの大きい場合の漸近形は

$$
\begin{aligned}
j_\ell(x) &\xrightarrow{x\to\infty} \frac{1}{x}\sin\left(x - \frac{\ell\pi}{2}\right) \\
n_\ell(x) &\xrightarrow{x\to\infty} -\frac{1}{x}\cos\left(x - \frac{\ell\pi}{2}\right) \\
h_\ell^{(1)}(x) &\xrightarrow{x\to\infty} (-i)^{\ell+1}\frac{e^{ix}}{x} \\
h_\ell^{(2)}(x) &\xrightarrow{x\to\infty} (i)^{\ell+1}\frac{e^{-ix}}{x}
\end{aligned}
$$

となる。

これらを用いた重要な２つの公式を述べる。

$$
e^{ikr\cos\theta} = \sum_{\ell=0}^{\infty}(2\ell+1) i^\ell j_\ell(kr) P_\ell(\cos\theta)
$$

$$
\frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r}-\vec{r}'|} = ik\sum_{\ell=0}^{\infty}(2\ell+1) j_\ell(kr_<) h_\ell^{(1)}(kr_>) P_\ell(\hat{r}\cdot\hat{r}')
$$