

# 光電子強度分布計算ソフト SPADExp

## 3. 原子ポテンシャルの計算

田中 宏明 (東京大学 物性研究所/理学系研究科物理学専攻)

2022 年 3 月 28 日

### 概要

方向依存性がなく距離  $r$  にのみ依存するポテンシャル  $V(r)$  中での波動関数を解析するために必要な特殊関数について、その性質を述べる。

### 目次

1	ガンマ関数	2
1.1	定義	2
1.2	性質	2
2	Bessel 関数・球 Bessel 関数	3
2.1	球 Bessel 関数から Bessel 関数への変換	3
2.2	Bessel 関数の級数展開	3
2.3	Neumann 関数	5
2.4	Bessel 関数の満たす漸化式	5
2.5	球 Bessel 関数・球 Neumann 関数の表式	6
2.6	漸近形	7
3	Coulomb 波動関数	8
3.1	合流型超幾何級数への変換	8
3.2	漸近形に基づく規格化	9
3.3	実関数であること	11
4	球面調和関数	11
4.1	球座標と直交座標の変換	11
4.2	球面調和関数の導出	12
4.3	具体的な表式	14
5	部分波展開	15

# 1 ガンマ関数

## 1.1 定義

ガンマ関数は階乗  $n!$  の自然な拡張であり、以下の式で定義される。

$$\Gamma(x) = \int_0^{\infty} e^{-t} t^{x-1} dt \quad (1)$$

## 1.2 性質

まず、 $x = 1$  のとき

$$\Gamma(1) = \int_0^{\infty} e^{-t} dt = 1 \quad (2)$$

である。次に、部分積分により

$$\Gamma(x) = \int_0^{\infty} e^{-t} t^{x-1} dt \quad (3)$$

$$= \left[ -e^{-t} t^{x-1} \right]_0^{\infty} + (x-1) \int_0^{\infty} e^{-t} t^{x-2} dt = (x-1) \Gamma(x-1) \quad (4)$$

が得られる。式 (2) と式 (4) から、 $x$  が正整数  $n$  の場合

$$\Gamma(n) = (n-1)(n-2) \cdot 1 \cdot \Gamma(1) = (n-1)! \quad (5)$$

となる。

次に、 $x$  が半整数の場合を考える。

$$\Gamma(1/2) = \int_0^{\infty} e^{-t} t^{-1/2} dt \quad (6)$$

$$= 2 \int_0^{\infty} e^{-u^2} du \quad (t = u^2, \quad dt = 2u du) \quad (7)$$

$$= \sqrt{\pi} \quad (8)$$

であることから、

$$\Gamma(n+1/2) = (n-1/2)(n-3/2) \cdot 1/2 \cdot \Gamma(1/2) \quad (9)$$

$$= \frac{(2n-1)!}{(n-1)! \cdot 2^{n-1}} \sqrt{\pi} \quad (10)$$

$$= \frac{(2n-1)!}{(n-1)! \cdot 2^{2n-1}} \sqrt{\pi} \quad (n \geq 1) \quad (11)$$

である。 $n = 0$  の場合も含めた表式にするには、分母と分子に  $2n$  を掛けて

$$\Gamma(n+1/2) = \frac{(2n)!}{n! \cdot 2^{2n}} \sqrt{\pi} \quad (12)$$

とすればよい。

$x$  が 0 および負の整数でなければ式 (1) は発散しないので、ガンマ関数の定義域を複素数空間に拡張することができる。このとき、

$$\Gamma(z^*) = \int_0^{\infty} e^{-t} t^{z^*-1} dt = \left[ \int_0^{\infty} e^{-t} t^{z-1} dt \right]^* = \Gamma(z)^* \quad (13)$$

が成り立つ。

## 2 Bessel 関数・球 Bessel 関数

$V(r) = 0$  のときの Schrödinger 方程式の解は球 Bessel 関数に帰着する。さらに変換を施すことで、球 Bessel 関数を Bessel 関数を用いて表すことができる。

### 2.1 球 Bessel 関数から Bessel 関数への変換

$V(r) = 0$  の動径方向 Schrödinger 方程式を  $x = kr$  によって変数変換することで、球 Bessel 関数に帰着できる。球 Bessel 関数の満たす微分方程式は、

$$\left[ x^2 \frac{d^2}{dx^2} + 2x \frac{d}{dx} + (x^2 - l(l+1)) \right] j_l(x) = 0 \quad (14)$$

これを、Bessel 微分方程式

$$\left[ x^2 \frac{d^2}{dx^2} + x \frac{d}{dx} + (x^2 - \nu^2) \right] J_\nu(x) = 0 \quad (15)$$

に変換することを考える。 $j_l(x) = x^{-1/2} f(x)$  とおくと

$$\frac{d}{dx} j_l(x) = x^{-1/2} \frac{df(x)}{dx} - \frac{1}{2} x^{-3/2} f(x) \quad (16)$$

$$\frac{d^2}{dx^2} j_l(x) = x^{-1/2} \frac{d^2 f(x)}{dx^2} - x^{-3/2} \frac{df(x)}{dx} + \frac{3}{4} x^{-5/2} f(x) \quad (17)$$

となり、代入して整理すると

$$\left[ x^2 \frac{d^2}{dx^2} + x \frac{d}{dx} + (x^2 - (l+1/2)^2) \right] f(x) = 0 \quad (18)$$

を得る。ここから、球 Bessel 関数  $j_l(x)$  を Bessel 関数  $J_\nu(x)$  で表すと

$$j_l(x) = \sqrt{\frac{\pi}{2x}} J_{l+1/2}(x) \quad (19)$$

となることが分かる。係数  $\sqrt{\pi/2}$  は後の便宜のために付けた。

### 2.2 Bessel 関数の級数展開

Bessel 関数  $J_\nu(x)$  を、級数展開により求める。以下、いくつかの議論は  $\nu$  が半整数  $l+1/2$  であることを想定して行う。

まず、Bessel 関数を

$$J_\nu(x) = \sum_{j=0}^{\infty} a_j x^{c+j}, \quad a_0 \neq 0 \quad (20)$$

で級数展開する。

$$\frac{d}{dx} J_\nu(x) = \sum_{j=0}^{\infty} a_j (c+j) x^{c+j-1} \quad (21)$$

$$\frac{d^2}{dx^2} J_\nu(x) = \sum_{j=0}^{\infty} a_j (c+j)(c+j-1) x^{c+j-2} \quad (22)$$

となることから、代入して整理すると

$$\sum_{j=0}^{\infty} a_j \left[ ((c+j)^2 - \nu^2) x^{c+j} + x^{c+j+2} \right] = 0 \quad (23)$$

を得る。 $x^{c+j}$  の項を取り出すと、

$$j = 0, 1: a_j((c+j)^2 - \nu^2) = 0 \quad (24)$$

$$j \geq 2: a_j((c+j)^2 - \nu^2) + a_{j-2} = 0 \iff a_j = \frac{-1}{(c+j)^2 - \nu^2} a_{j-2} \quad ((c+j)^2 - \nu^2 \neq 0 \text{ のとき}) \quad (25)$$

となる。 $a_0 \neq 0$  の条件から、 $c = \pm \nu$  であることが分かる。

次に  $j = 1$  の式を考えると、 $(c+j)^2 - \nu^2 = \pm 2\nu + 1$  であることから、 $\nu = \pm 1/2$  の場合以外は  $a_1 = 0$  が必要である。従って、式 (25) より帰納的に  $j$  が奇数の項は全て消えることが分かる。 $\nu = \pm 1/2$  の場合についても、 $a_1 = 0$  としても一般性を失わないことが以下のようにして分かる。まず  $\nu = 1/2$  のとき、 $c = -\nu = -1/2$  の解が非零の  $a_1$  を持てる。 $X(x, y) = -1/(x^2 - y^2)$  とすると ( $x = c + j$ ,  $y = \nu$  に相当)、解は

$$c = \nu = 1/2: J_\nu(x) = a_0 x^{1/2} + X(5/2, 1/2) a_0 x^{5/2} + X(9/2, 1/2) X(5/2, 1/2) a_0 x^{9/2} + \dots \quad (26)$$

$$c = -\nu = -1/2: J_\nu(x) = a_0 x^{-1/2} + X(3/2, 1/2) a_0 x^{3/2} + X(7/2, 1/2) X(3/2, 1/2) a_0 x^{7/2} \dots \\ + a_1 x^{1/2} + X(5/2, 1/2) a_1 x^{5/2} + X(9/2, 1/2) X(5/2, 1/2) a_1 x^{9/2} + \dots \quad (27)$$

と表される。しかし、式 (27) の  $a_1$  に由来する項は式 (26) の定数倍であることから差し引くことができ、 $a_1 = 0$  として考えることができる。 $\nu = -1/2$  のときも同様。

以上より、 $a_j$  は  $j = 2k$  ( $k = 0, 1, \dots$ ) となる偶数のときに非零の値を取る。 $\nu$  が半整数のとき、式 (25) の分母がゼロとなる  $j = \mp 2\nu$  の条件は満たされない。<sup>\*1</sup>従って、 $a_{2k}$  は  $a_0$  から帰納的に求めることができる。

まず  $c = \nu$  のとき、

$$X(c+j, \nu) = -\frac{1}{(\nu+j)^2 - \nu^2} = \frac{-1}{j(2\nu+j)} \quad (28)$$

であり、漸化式 (25) を用いて計算すると、

$$a_{2k} = \frac{-1}{4k(\nu+k)} a_{2k-2} \quad (29)$$

$$= \frac{-1}{4k(k+j)} \frac{-1}{4(k-1)(\nu+k-1)} a_{2k-4} \quad (30)$$

$$= \dots = \frac{(-1)^k}{2^{2k} k! \cdot (\nu+k) \dots (\nu+1)} a_0 \quad (31)$$

となる。ここで式 (4) を用いると

$$(\nu+k) \dots (\nu+1) = \frac{\Gamma(\nu+k+1)}{\Gamma(\nu+1)} \quad (32)$$

となることから、

$$a_{2k} = \frac{(-1)^k \Gamma(\nu+1)}{2^{2k} k! \cdot \Gamma(\nu+k+1)} a_0 \quad (33)$$

であり、さらに

$$a_0 = \frac{1}{2^\nu \Gamma(\nu+1)} \quad (34)$$

---

<sup>\*1</sup>  $\nu$  が正整数で  $c = -\nu$  のとき、式 (25) の  $j = 2\nu$  を考えると  $a_{2\nu-2} = 0$  となる。漸化式を戻っていくと  $a_0, \dots, a_{2\nu-2} = 0$  となり、最初に非零となるのは  $a_{2\nu}$  である。この場合、 $c = \nu$  と実質同じ解のみが得られる。

とすることで

$$a_{2k} = \frac{(-1)^k}{2^{2k+\nu} k! \cdot \Gamma(\nu + k + 1)} \quad (35)$$

となる。

$c = -\nu$  のときは、

$$X(c + j, \nu) = \frac{-1}{j(-2\nu + j)} \quad (36)$$

となり、

$$a_{2k} = \frac{(-1)^k}{2^{2k-\nu} k! \cdot \Gamma(-\nu + k + 1)} \quad (a_0 = 1/(2^{-\nu} \Gamma(-\nu + 1))) \quad (37)$$

である。

以上をまとめると、Bessel 方程式のふたつの解は

$$J_\nu(x) = \left(\frac{x}{2}\right)^\nu \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{k! \cdot \Gamma(\nu + k + 1)} \left(\frac{x}{2}\right)^{2k} \quad (38)$$

および  $J_{-\nu}(x)$  である。

## 2.3 Neumann 関数

$\nu$  が整数でないとき、 $J_\nu(x)$  と  $J_{-\nu}(x)$  は Bessel 方程式の線型独立な 2 つの解となる。ただ、 $J_{-\nu}(x)$  の代わりに

$$Y_\nu(x) = \frac{1}{\sin(\nu\pi)} (\cos(\nu\pi) J_\nu(x) - J_{-\nu}(x)) \quad (39)$$

で定義される Neumann 関数がよく用いられる。もっとも、 $\nu = l + 1/2$  の半整数のときは

$$Y_{l+1/2}(x) = (-1)^{l+1} J_{-(l+1/2)}(x) \quad (40)$$

なので  $J_{-(l+1/2)}(x)$  と符号の違いしかない。 $y_l(x) = \sqrt{\pi/2x} \cdot Y_{l+1/2}(x)$  は球 Neumann 関数と呼ばれ、 $x = 0$  で発散する解である。

## 2.4 Bessel 関数の満たす漸化式

$J_\nu(x)$  は、

$$\frac{d}{dx} (x^{-\nu} J_\nu(x)) = -x^{-\nu} J_{\nu+1}(x) \quad (41)$$

の漸化式を満たす。実際、級数展開を代入すると

$$\frac{d}{dx} (x^{-\nu} J_\nu(x)) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{k! \cdot \Gamma(\nu + k + 1)} \frac{2kx^{2k-1}}{2^{2k+\nu}} \quad (42)$$

$$= \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^k}{(k-1)! \cdot \Gamma(\nu + k + 1)} \frac{x^{2k-1}}{2^{2k+\nu-1}} \quad (k=0 \text{ の項はゼロ}) \quad (43)$$

$$= \sum_{K=0}^{\infty} \frac{-(-1)^K}{K! \cdot \Gamma(\nu + K + 2)} \frac{x^{2K+1}}{2^{2K+\nu+1}} \quad (K = k-1) \quad (44)$$

$$= -x^{-\nu} \sum_{K=0}^{\infty} \frac{(-1)^K}{K! \cdot \Gamma(\nu + K + 2)} \left(\frac{x}{2}\right)^{2K+\nu+1} \quad (45)$$

$$= -x^{-\nu} J_{\nu+1}(x) \quad (46)$$

となっている。

また、

$$\frac{d}{dx} \left( x^\nu J_\nu(x) \right) = x^\nu J_{\nu-1}(x) \quad (47)$$

の漸化式も満たす。級数展開を代入すると

$$\frac{d}{dx} \left( x^\nu J_\nu(x) \right) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{k! \cdot \Gamma(\nu + k + 1)} \frac{(2k + 2\nu)x^{2k+2\nu-1}}{2^{2k+\nu}} \quad (48)$$

$$= \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^k}{(k-1)! \cdot \Gamma(\nu + k)} \frac{x^{2k+2\nu-1}}{2^{2k+\nu-1}} \quad (\because \Gamma(\nu + k + 1) = (\nu + k)\Gamma(\nu + k)) \quad (49)$$

$$= x^\nu \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{k! \cdot \Gamma(\nu + k)} \left( \frac{x}{2} \right)^{2k+\nu-1} \quad (50)$$

$$= x^\nu J_{\nu-1}(x) \quad (51)$$

となる。

## 2.5 球 Bessel 関数・球 Neumann 関数の表式

前節の漸化式および、 $\nu = 1/2$  での Bessel 関数

$$J_{1/2}(x) = \sqrt{\frac{x}{2}} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{k! \cdot \Gamma(k + 1 + 1/2)} \left( \frac{x}{2} \right)^{2k} \quad (52)$$

$$= \sqrt{\frac{x}{2}} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k (k+1)! \cdot 2^{2k+2}}{k! \cdot (2k+2)! \cdot \sqrt{\pi}} \left( \frac{x}{2} \right)^{2k} \quad (\because (12)) \quad (53)$$

$$= \sqrt{\frac{2}{\pi x}} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{(2k+1)!} x^{2k+1} = \sqrt{\frac{2}{\pi x}} \sin x \quad (54)$$

から、 $\nu$  が正の半整数のときの Bessel 関数は

$$J_{l+1/2}(x) = -x^{l-1/2} \frac{d}{dx} \left( x^{-(l-1/2)} J_{l-1/2}(x) \right) \quad (55)$$

$$= -x^{l-1/2} \frac{d}{dx} \left( -\frac{1}{x} \frac{d}{dx} \left( x^{-(l-3/2)} J_{l-3/2}(x) \right) \right) \quad (56)$$

$$= (-1)^l x^{l+1/2} \left( \frac{1}{x} \frac{d}{dx} \right)^l x^{-1/2} J_{1/2}(x) \quad (57)$$

$$= \sqrt{\frac{2}{\pi}} (-1)^l x^{l+1/2} \left( \frac{1}{x} \frac{d}{dx} \right)^l \frac{\sin x}{x} \quad (58)$$

であり、球 Bessel 関数は

$$j_l(x) = (-1)^l x^l \left( \frac{1}{x} \frac{d}{dx} \right)^l \frac{\sin x}{x} \quad (59)$$

と表すことができる。

球 Bessel 関数の具体的な表式は以下のようになる。

$$j_0(x) = \frac{\sin x}{x} \quad (60)$$

$$j_1(x) = \frac{\sin x - x \cos x}{x^2} \quad (61)$$

$$j_2(x) = \frac{(3 - x^2) \sin x - 3x \cos x}{x^3} \quad (62)$$

$$j_3(x) = \frac{(15 - 6x^2) \sin x + (x^3 - 15x) \cos x}{x^4} \quad (63)$$

$$j_4(x) = \frac{(x^4 - 45x^2 + 105) \sin x + (10x^3 - 105x) \cos x}{x^5} \quad (64)$$

また、 $\nu = -1/2$  での Bessel 関数

$$J_{-1/2}(x) = \sqrt{\frac{2}{x}} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{k! \cdot \Gamma(k + 1/2)} \left(\frac{x}{2}\right)^{2k} \quad (65)$$

$$= \sqrt{\frac{2}{x}} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k k! \cdot 2^{2k}}{k! \cdot (2k)! \cdot \sqrt{\pi}} \left(\frac{x}{2}\right)^{2k} \quad (\because (12)) \quad (66)$$

$$= \sqrt{\frac{2}{\pi x}} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{(2k)!} x^{2k} = \sqrt{\frac{2}{\pi x}} \cos x \quad (67)$$

から、 $\nu$  が負の半整数のときの Bessel 関数は

$$J_{-l-1/2}(x) = x^{l-1/2} \frac{d}{dx} \left( x^{-l+1/2} J_{-l+1/2}(x) \right) \quad (68)$$

$$= x^{l-1/2} \frac{d}{dx} \left( \frac{1}{x} \frac{d}{dx} \left( x^{-l+3/2} J_{-l+3/2}(x) \right) \right) \quad (69)$$

$$= x^{l+1/2} \left( \frac{1}{x} \frac{d}{dx} \right)^l x^{-1/2} J_{-1/2}(x) \quad (70)$$

$$= \sqrt{\frac{2}{\pi}} x^{l+1/2} \left( \frac{1}{x} \frac{d}{dx} \right)^l \frac{\cos x}{x} \quad (71)$$

であり、球 Neumann 関数は

$$y_l(x) = (-1)^{l+1} x^l \left( \frac{1}{x} \frac{d}{dx} \right)^l \frac{\cos x}{x} \quad (72)$$

と表される。

## 2.6 漸近形

$x \rightarrow 0$  の漸近形は、級数展開で  $x$  の最低次の項が一番支配的になるので、

$$J_\nu(x) \sim \left(\frac{x}{2}\right)^\nu \frac{1}{\Gamma(\nu + 1)} \quad (73)$$

である。ここから、球 Bessel 関数の漸近形は

$$j_l(x) \sim \sqrt{\frac{\pi}{2x}} \left(\frac{x}{2}\right)^{l+1/2} \frac{1}{\Gamma(l + 1 + 1/2)} \quad (74)$$

$$= \sqrt{\frac{\pi}{2x}} \left(\frac{x}{2}\right)^{l+1/2} \frac{(l + 1)! \cdot 2^{2l+2}}{(2l + 2)! \cdot \sqrt{\pi}} \quad (\because (12)) \quad (75)$$

$$= \frac{2^l l!}{(2l + 1)!} x^l \quad (76)$$

と求められる。

$x \rightarrow \infty$  の漸近形は、前節の表式で三角関数を微分し続けた項が一番支配的になるので

$$j_l(x) \sim (-1)^l \frac{1}{x} \frac{d^l}{dx^l} \sin x \quad (77)$$

$$= \frac{1}{x} \frac{(-1)^l}{2i} \left( i^l \text{cis}(x) - (-i)^l \text{cis}(-x) \right) \quad (78)$$

$$= \frac{1}{x} \frac{\text{cis}(x - l\pi/2) - \text{cis}(-(x - l\pi/2))}{2i} \quad (79)$$

$$= \frac{\sin(x - l\pi/2)}{x} \quad (80)$$

であり、球 Neumann 関数の場合は

$$y_l(x) \sim (-1)^{l+1} \frac{1}{x} \frac{d^l}{dx^l} \cos x \quad (81)$$

$$= \frac{1}{x} \frac{(-1)^{l+1}}{2} \left( i^l \text{cis}(x) + (-i)^l \text{cis}(-x) \right) \quad (82)$$

$$= \frac{-1}{x} \frac{\text{cis}(x - l\pi/2) + \text{cis}(-(x - l\pi/2))}{2} \quad (83)$$

$$= -\frac{\cos(x - l\pi/2)}{x} \quad (84)$$

である。 $\text{cis}(x) = e^{ix} = \cos x + i \sin x$  である。

### 3 Coulomb 波動関数

Coulomb 波動関数は、Coulomb ポテンシャル  $V(r) = -1/r$  が存在するときの Schrödinger 方程式の解である。

#### 3.1 合流型超幾何級数への変換

Coulomb ポテンシャル下における動径方向の Schrödinger 方程式を、 $E = k^2/2$  および  $r = x/k$  の変数変換によって整理すると

$$\left[ \frac{d^2}{dx^2} + 1 + \frac{2}{kx} - \frac{l(l+1)}{x^2} \right] f(x) = 0 \quad (85)$$

を得る。

まず、これを Whittaker 関数

$$\left[ \frac{d^2}{dz^2} - \frac{1}{4} + \frac{\kappa}{z} + \frac{1/4 - \mu^2}{z^2} \right] g(z) = 0 \quad (86)$$

に変換することを考える。 $x = z/2i$  を用いると、

$$(85) \iff \left[ -4 \frac{d^2}{dz^2} + 1 + \frac{4i}{kz} + \frac{4l(l+1)}{z^2} \right] f(z/2i) = 0 \quad (87)$$

$$\iff \left[ \frac{d^2}{dz^2} - \frac{1}{4} - \frac{i}{kz} + \frac{1/4 - (l+1/2)^2}{z^2} \right] f(z/2i) = 0 \quad (88)$$

となるので、

$$g(z) = f(x) = f(z/2i), \quad \kappa = -\frac{i}{k}, \quad \mu = l + \frac{1}{2} \quad (89)$$

の対応関係が得られる。



次に、Whittaker 関数を合流型超幾何級数

$$\left[ z \frac{d^2}{dz^2} + (b - z) \frac{d}{dz} - a \right] h(z) = 0 \quad (90)$$

に変換する。  $g(z) = e^{-z/2} z^{\mu+1/2} h(z)$  を代入すると、

$$\frac{d}{dz} g(z) = -\frac{1}{2} e^{-z/2} z^{\mu+1/2} h(z) + (\mu + 1/2) e^{-z/2} z^{\mu-1/2} h(z) + e^{-z/2} z^{\mu+1/2} \frac{dh(z)}{dz} \quad (91)$$

$$\begin{aligned} \frac{d^2}{dz^2} g(z) = & \frac{1}{4} e^{-z/2} z^{\mu+1/2} h(z) + (\mu^2 - 1/4) e^{-z/2} z^{\mu-3/2} h(z) + e^{-z/2} z^{\mu+1/2} \frac{d^2 h(z)}{dz^2} \\ & + 2 \left[ -\frac{\mu + 1/2}{2} e^{-z/2} z^{\mu-1/2} h(z) - \frac{1}{2} e^{-z/2} z^{\mu+1/2} \frac{dh(z)}{dz} + (\mu + 1/2) e^{-z/2} z^{\mu-1/2} \frac{dh(z)}{dz} \right] \end{aligned} \quad (92)$$

より

$$(86) \iff \left[ \frac{d^2}{dz^2} + \left( -1 + \frac{2\mu+1}{z} \right) \frac{d}{dz} + \frac{\kappa - (\mu + 1/2)}{z} \right] h(z) = 0 \quad (93)$$

$$\iff \left[ z \frac{d^2}{dz^2} + (2\mu + 1 - z) \frac{d}{dz} - (\mu - \kappa + 1/2) \right] h(z) = 0 \quad (94)$$

となる。ここから、

$$b = 2\mu + 1 = 2(l + 1), \quad a = \mu - \kappa + \frac{1}{2} = l + 1 + \frac{i}{k} \quad (95)$$

の対応関係となる。

合流型超幾何級数の正則解、非正則解はそれぞれ  $M(a, b, z)$  および  $U(a, b, z)$  で表される。

$$M(a, b, z) = \sum_{s=0}^{\infty} \frac{(a)_s}{(b)_s s!} z^s \quad (96)$$

ここで、

$$(a)_s = a(a+1) \cdots (a+s-1), \quad (a)_0 = 1 \quad (97)$$

は Pochhammer 記号である。  $U(a, b, z)$  は  $a$  と  $b$  の値により表式が変わる。今の場合、

$$\begin{aligned} U(a, n+1, z) = & \frac{(-1)^{n+1}}{n! \Gamma(a-n)} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(a)_k}{(n+1)_k k!} z^k (\log z + \psi(a+k) - \psi(1+k) - \psi(n+k+1)) \\ & + \frac{1}{\Gamma(a)} \sum_{k=1}^n \frac{(k-1)!(1-a+k)_{n-k}}{(n-k)!} z^{-k}, \quad n = 0, 1, \dots, a \neq 0, -1, \dots \end{aligned} \quad (98)$$

$$\psi(x) = \frac{1}{\Gamma(x)} \frac{d\Gamma(x)}{dx} \quad (99)$$

であり、  $\psi(x)$  はディガンマ関数と呼ばれる。

### 3.2 漸近形に基づく規格化

$M(a, b, z)$ ,  $U(a, b, z)$  の  $z \rightarrow \infty$  における漸近形は、

$$\begin{aligned} M(a, b, z) \sim & \frac{\Gamma(b)}{\Gamma(a)} e^z z^{a-b} \sum_{s=0}^{\infty} \frac{(1-a)_s (b-a)_s}{s!} z^{-s} \\ & + \frac{\Gamma(b)}{\Gamma(b-a)} e^{i\pi a} z^{-a} \sum_{s=0}^{\infty} \frac{(a)_s (a-b+1)_s}{s!} (-z)^{-s}, \quad -\frac{\pi}{2} + \delta \leq \arg z \leq \frac{3\pi}{2} - \delta \end{aligned} \quad (100)$$

$$U(a, b, z) \sim z^{-a} \sum_{s=0}^{\infty} \frac{(a)_s (a-b+1)_s}{s!} (-z)^{-s}, \quad |\arg z| \leq \frac{3\pi}{2} - \delta \quad (101)$$

である。 $z = 2ix$  であり  $x \geq 0$  を考えるので、 $z$  の偏角は  $\frac{\pi}{2}$  でとることになる。

それぞれの漸近形について、 $x$  の最高次の項のみを取り出す。まず  $M(a, b, z)$  については、第 1 項の最高次は  $z^{a-b}$ 、第 2 項は  $z^{-a}$  であり、

$$z^{a-b} = (2ix)^{-(l+1)+i/k} \quad (102)$$

$$= (2x)^{-(l+1)+i/k} \times \exp\left(\frac{\pi i}{2} \cdot (-(l+1) + i/k)\right) \quad (103)$$

$$= (2x)^{-(l+1)} e^{-\pi/2k} \text{cis}\left[\frac{\log(2x)}{k} - \frac{\pi(l+1)}{2}\right] \quad (104)$$

$$z^{-a} = (2ix)^{-(l+1)-i/k} \quad (105)$$

$$= (2x)^{-(l+1)-i/k} \times \exp\left(\frac{\pi i}{2} \cdot (-(l+1) - i/k)\right) \quad (106)$$

$$= (2x)^{-(l+1)} e^{\pi/2k} \text{cis}\left[-\frac{\log(2x)}{k} - \frac{\pi(l+1)}{2}\right] \quad (107)$$

となるので同じオーダーである。この両者を考慮し、Whittaker 関数から合流型超幾何級数への変換で出てきた  $e^{-z/2} z^{\mu+1/2}$  も掛けると

$$e^{-ix} (2ix)^{l+1} \left[ \frac{\Gamma(2(l+1))}{\Gamma(l+1+i/k)} e^{2ix} (2x)^{-(l+1)} e^{-\pi/2k} \text{cis}\left(\frac{\log(2x)}{k} - \frac{\pi(l+1)}{2}\right) + \frac{\Gamma(2(l+1))}{\Gamma(l+1-i/k)} e^{i\pi(l+1+i/k)} (2x)^{-(l+1)} e^{\pi/2k} \text{cis}\left(-\frac{\log(2x)}{k} - \frac{\pi(l+1)}{2}\right) \right] \quad (108)$$

$$= i^{l+1} (2l+1)! e^{-\pi/2k} \left[ \frac{e^{ix}}{\Gamma(l+1+i/k)} \text{cis}\left(\frac{\log(2x)}{k} - \frac{\pi(l+1)}{2}\right) + \frac{e^{-ix}}{\Gamma(l+1-i/k)} \text{cis}\left(-\frac{\log(2x)}{k} + \frac{\pi(l+1)}{2}\right) \right] \quad (109)$$

$$= \frac{(-i)^{l+1} (2l+1)! e^{-\pi/2k}}{|\Gamma(l+1+i/k)|} \left[ \text{cis}\left(x + \frac{\log(2x)}{k} - \frac{l\pi}{2} + \arg \Gamma(l+1-i/k)\right) - \text{c.c.} \right] \quad (110)$$

$$= \frac{2 \cdot i^{l+1} (2l+1)! e^{-\pi/2k}}{|\Gamma(l+1+i/k)|} \sin\left(x + \frac{\log(2x)}{k} - \frac{l\pi}{2} + \arg \Gamma(l+1-i/k)\right) \quad (111)$$

となる。式変形には式 (13) を利用し、c.c. は第 1 項の複素共役を表す。 $f(kr)/r$  の漸近形が球 Bessel 関数の漸近形  $j_l(kr) \rightarrow \sin(kr - l\pi/2)/kr$  と対応するようにすると、 $f(x)$  は

$$f_1(x) = \frac{|\Gamma(l+1+i/k)| \cdot e^{\pi/2k}}{2k \cdot (2l+1)!} e^{-ix} (2x)^{l+1} M(l+1+i/k, 2l+2, 2ix) \quad (112)$$

$$f_1(kr) \rightarrow \frac{1}{k} \sin\left(kr + \frac{\log(2kr)}{k} - \frac{l\pi}{2} + \arg \Gamma(l+1-i/k)\right) \quad (113)$$

と規格化することになる。

$U(a, b, z)$  については、最高次のみとった漸近形が  $z^{-a}$  になることから、

$$e^{-ix} (2ix)^{l+1} (2ix)^{-(l+1)-i/k} = e^{\pi/2k} \text{cis}(-x - \log(2x)/k) \quad (114)$$

が漸近形として得られ。さらに、 $f(x)$  との適当な線型結合によって

$$f_2(kr) \rightarrow \frac{1}{k} \cos\left(kr + \frac{\log(2kr)}{k} - \frac{l\pi}{2} + \arg \Gamma(l+1-i/k)\right) \quad (115)$$

を漸近形として持つ解の存在が分かる。

$f_1(x)$  の  $x \rightarrow 0$  での振る舞いを調べる。 $M(a, b, z) \rightarrow 1$  となることから、

$$f_1(x) \rightarrow \frac{|\Gamma(l+1+i/k)| \cdot e^{\pi/2k}}{2k \cdot (2l+1)!} (2x)^{l+1} \quad (116)$$

である。すなわち、1 階微分が正になるよう符号を定めればよい。

### 3.3 実関数であること

$f_1(x)$  から実数係数を取り除いた

$$f_0(x) = e^{-ix}(2x)^{l+1}M(l+1+i/k, 2l+2, 2ix) \quad (117)$$

について、これが実関数であることを示す。

まず、 $M(a, b, z)$  の表式 (96) から

$$M(a, b, z)^* = M(a^*, b^*, z^*) \quad (118)$$

である。さらに、合流型超幾何級数の微分方程式から導ける関係式

$$M(a, b, z) = e^z M(b-a, b, -x) \quad (119)$$

も用いると、

$$f_0^*(x) = e^{ix}(2x)^{l+1}M(l+1-i/k, 2l+2, -2ix) \quad (120)$$

$$= e^{ix}(2x)^{l+1}e^{-2ix}M(l+1+i/k, 2l+2, 2ix) \quad (121)$$

$$= e^{-ix}(2x)^{l+1}M(l+1+i/k, 2l+2, 2ix) = f_0(x) \quad (122)$$

となることから、 $f_0(x)$  は実関数である。

## 4 球面調和関数

球面調和関数は、角運動量の固有状態を表す。

### 4.1 球座標と直交座標の変換

位置ベクトル  $\mathbf{r}$  を球座標と直交座標で表すと

$$\mathbf{r} = \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} r \sin \theta \cos \varphi \\ r \sin \theta \sin \varphi \\ r \cos \theta \end{pmatrix} \quad (123)$$

距離  $r$  に関する偏微分を用いた表式

$$f(r + \Delta r, \theta, \varphi) - f(r, \theta, \varphi) = \Delta r \frac{\partial}{\partial r} f(\mathbf{r}) \quad (124)$$

を直交座標で表そうとすると、

$$f(r + \Delta r, \theta, \varphi) - f(r, \theta, \varphi) = f(x + \Delta r \sin \theta \cos \varphi, y + \Delta r \sin \theta \sin \varphi, z + \Delta r \cos \theta) - f(x, y, z) \quad (125)$$

$$= \Delta r \left[ \sin \theta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial x} + \sin \theta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial y} + \cos \theta \frac{\partial}{\partial z} \right] f(\mathbf{r}) \quad (126)$$

となるので、

$$\frac{\partial}{\partial r} = \sin \theta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial x} + \sin \theta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial y} + \cos \theta \frac{\partial}{\partial z} \quad (127)$$

の関係がある。同様にして、

$$\frac{\partial}{\partial \theta} = r \cos \theta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial x} + r \cos \theta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial y} - r \sin \theta \frac{\partial}{\partial z} \quad (128)$$

$$\frac{\partial}{\partial \varphi} = -r \sin \theta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial x} + r \sin \theta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial y} \quad (129)$$

の関係と、これらの逆変換

$$\frac{\partial}{\partial x} = \sin \theta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos \theta \cos \varphi}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{\sin \varphi}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \quad (130)$$

$$\frac{\partial}{\partial y} = \sin \theta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos \theta \sin \varphi}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\cos \varphi}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \quad (131)$$

$$\frac{\partial}{\partial z} = \cos \theta \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\sin \theta}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \quad (132)$$

が得られる。これらを用いることで、以下の関係式を示すことができる。

$$\Delta = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\mathbf{L}^2}{r^2}, \quad \mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p} = -i\mathbf{r} \times \nabla \quad (133)$$

$$L_z = -i \left( x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) = -i \frac{\partial}{\partial \varphi} \quad (134)$$

$$L_{\pm} = L_x \pm iL_y = e^{\pm i\varphi} \left( \pm \frac{\partial}{\partial \theta} + i \frac{\cos \theta}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \quad (135)$$

## 4.2 球面調和関数の導出

$\mathbf{L}^2$  および  $L_z$  の固有状態

$$\mathbf{L}^2 Y_{lm}(\theta, \varphi) = l(l+1) Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad (136)$$

$$L_z Y_{lm}(\theta, \varphi) = m Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad (137)$$

を求める。まず、式 (134) と式 (137) から球面調和関数を

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) = \Theta(\theta) \Phi(\varphi) \quad (138)$$

$$L_z \Phi(\varphi) = -i \frac{\partial}{\partial \varphi} \Phi(\varphi) = m \Phi(\varphi) \quad (139)$$

と変数分離できる。規格化は、

$$\int_0^\pi \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi |Y_{lm}(\theta, \varphi)|^2 = \int_0^\pi |\Theta(\theta)|^2 \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} |\Phi(\varphi)|^2 d\varphi = 1 \times 1 \quad (140)$$

のように、 $\theta, \varphi$  に関する積分がそれぞれ 1 になるようにする。 $\varphi$  に関する微分方程式は簡単に解くことができ、

$$\Phi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi} \quad (141)$$

となる。 $1/\sqrt{2\pi}$  は規格化のためつけた。

次に  $\Theta(\theta)$  を求める。昇降演算子の性質から、 $m = l$  のとき

$$L_+ \left( \Theta_l(\theta) \Phi_l(\varphi) \right) = 0 \quad (142)$$

$$\iff \left[ \frac{\partial}{\partial \theta} - l \frac{\cos \theta}{\sin \theta} \right] \Theta_l(\theta) = 0 \quad (143)$$

となるので、これを解いて

$$\Theta_l(\theta) = (-1)^l \sqrt{\frac{(2l+1)!}{2}} \frac{1}{2^l l!} \sin^l \theta \quad (144)$$

となる。関数の規格化は、

$$I_l = \int_0^\pi \sin^{2l+1} \theta d\theta = 2l \int_0^\pi (1 - \sin^2 \theta) \sin^{2l-1} \theta d\theta = 2l(I_{l-1} - I_l) \quad (145)$$

$$\therefore I_l = \frac{2l}{2l+1} I_{l-1} \quad (146)$$

および  $I_0 = 2$  より、

$$I_l = \frac{2l}{2l+1} \frac{2l-2}{2l-1} \cdots \frac{2}{3} I_0 = \frac{2 \cdot (2^l l!)^2}{(2l+1)!} \quad (147)$$

であることから行われ、 $(-1)^l$  は後の便宜のためにつけた。

$\Theta_{lm}(\theta)$  が求まったら、昇降演算子の性質

$$L_- Y_{lm}(\theta, \varphi) = \sqrt{(l+m)(l-m+1)} Y_{lm-1}(\theta, \varphi) \quad (148)$$

によって  $\Theta_{lm}$  を求められる。

$$L_- \Theta_{lm}(\theta) \Phi_m(\varphi) = \left( -\frac{\partial}{\partial \theta} - m \frac{\cos \theta}{\sin \theta} \right) \Theta_{lm}(\theta) \Phi_{m-1}(\varphi) \quad (149)$$

より

$$\Theta_{lm-1}(\theta) = -\frac{1}{\sqrt{(l+m)(l-m+1)}} \left( \frac{d}{d\theta} + m \frac{\cos \theta}{\sin \theta} \right) \Theta_{lm}(\theta) \quad (150)$$

ここで、 $x = \cos \theta$  で変数変換することを考えると、 $dx = -\sin \theta d\theta$  であることから

$$\sin^{1-m} \theta \frac{d}{dx} [\sin^m \theta \cdot f(\theta)] = \sin \theta \frac{d}{dx} f(\theta) - m \cos \theta \frac{d\theta}{dx} f(\theta) = -\left( \frac{d}{d\theta} + m \frac{\cos \theta}{\sin \theta} \right) f(\theta) \quad (151)$$

が成り立つ。これを代入して

$$\Theta_{lm-1}(\theta) = \frac{\sin^{1-m} \theta}{\sqrt{(l+m)(l-m+1)}} \frac{d}{dx} [\sin^m \theta \cdot \Theta_{lm}(\theta)] \quad (152)$$

であり、繰り返して用いることで

$$\Theta_{lm}(\theta) = \sqrt{\frac{(l+m)!}{(2l)!(l-m)!}} \frac{1}{\sin^m \theta} \left( \frac{d}{dx} \right)^{l-m} \sin^l \theta \cdot \Theta_{l0}(\theta) \quad (153)$$

$$= (-1)^l \sqrt{\frac{2l+1}{2} \frac{(l+m)!}{(l-m)!}} \frac{1}{2^l l!} \frac{1}{\sin^m \theta} \left( \frac{d}{dx} \right)^{l-m} \sin^{2l} \theta \quad (154)$$

を得る。前と同様の議論から、

$$\Theta_{lm+1}(\theta) = -\frac{\sin^{1+m} \theta}{\sqrt{(l-m)(l+m+1)}} \frac{d}{dx} [\sin^{-m} \theta \cdot \Theta_{lm}(\theta)] \quad (155)$$

も導出できる。

特に  $m = 0$  のとき、

$$\Theta_{l0}(\theta) = (-1)^l \sqrt{\frac{2l+1}{2}} \frac{1}{2^l l!} \left( \frac{d}{dx} \right)^l \sin^{2l} \theta = \sqrt{\frac{2l+1}{2}} P_l(\cos \theta) \quad (156)$$

となる。ここで、

$$P_l(x) = \frac{1}{2^l l!} \left( \frac{d}{dx} \right)^l (x^2 - 1)^l \quad (157)$$

は Legendre 多項式の Roudrigues 公式による表現である。 $\Theta_{l0}$  に昇降演算子を作用させることで  $\Theta_{lm}$  を求めることにすると、 $m \geq 0$  として

$$\Theta_{lm}(\theta) = (-1)^m \sqrt{\frac{2l+1}{2} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} \sin^m \theta \left( \frac{d}{dx} \right)^m P_l(x) \quad (158)$$

$$\Theta_{l-m}(\theta) = \sqrt{\frac{2l+1}{2} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} \sin^m \theta \left( \frac{d}{dx} \right)^m P_l(x) = (-1)^m \Theta_{lm}(\theta) \quad (159)$$

となる。

### 4.3 具体的な表式

まず、Legendre 多項式の具体的な表式は以下のようになる。

$$P_0(x) = 1 \quad (160)$$

$$P_1(x) = x \quad (161)$$

$$P_2(x) = \frac{3}{2}x^2 - \frac{1}{2} \quad (162)$$

$$P_3(x) = \frac{5}{2}x^3 - \frac{3}{2}x \quad (163)$$

$$P_4(x) = \frac{35}{8}x^4 - \frac{15}{4}x^2 + \frac{3}{8} \quad (164)$$

$\Theta_{ll}(\theta)$  に昇降演算子を作用させていき、 $\Theta_{lm}(\theta)$  の具体的な表式が得られる。 $\Theta_{l-m}(\theta)$  は  $(-1)^m \Theta_{lm}(\theta)$  で求められるため省略した。

$$\Theta_{00}(\theta) = \frac{1}{\sqrt{2}} \quad (165)$$

$$\Theta_{11}(\theta) = -\frac{\sqrt{3}}{2} \sin \theta \quad (166)$$

$$\Theta_{10}(\theta) = \sqrt{\frac{3}{2}} \cos \theta \quad (167)$$

$$\Theta_{22}(\theta) = \frac{\sqrt{15}}{4} \sin^2 \theta \quad (168)$$

$$\Theta_{21}(\theta) = -\frac{\sqrt{15}}{2} \sin \theta \cos \theta \quad (169)$$

$$\Theta_{20}(\theta) = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{5}{2}} (3 \cos^2 \theta - 1) \quad (170)$$

$$\Theta_{33}(\theta) = -\frac{\sqrt{70}}{8} \sin^3 \theta \quad (171)$$

$$\Theta_{32}(\theta) = \frac{\sqrt{105}}{4} \sin^2 \theta \cos \theta \quad (172)$$

$$\Theta_{31}(\theta) = -\frac{\sqrt{42}}{8} (5 \cos^2 \theta - 1) \sin \theta \quad (173)$$

$$\Theta_{30}(\theta) = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{7}{2}} (5 \cos^2 \theta - 3) \cos \theta \quad (174)$$

$$\Theta_{44}(\theta) = \frac{3\sqrt{35}}{16} \sin^4 \theta \quad (175)$$

$$\Theta_{43}(\theta) = -\frac{3\sqrt{70}}{8} \sin^3 \theta \cos \theta \quad (176)$$

$$\Theta_{42}(\theta) = \frac{3\sqrt{5}}{8} (7 \cos^2 \theta - 1) \sin^2 \theta \quad (177)$$

$$\Theta_{41}(\theta) = -\frac{3\sqrt{10}}{8} (7 \cos^2 \theta - 3) \sin \theta \cos \theta \quad (178)$$

$$\Theta_{40}(\theta) = \frac{3\sqrt{2}}{16} (35 \cos^4 \theta - 20 \cos^2 \theta + 3) \quad (179)$$

## 5 部分波展開

平面波  $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$  は球 Bessel 関数と球面調和関数によって展開できる。

まず、 $\mathbf{k}$  が  $z$  軸に平行の場合は

$$e^{ikr \cos \theta} = \sum_l i^l (2l+1) j_l(kr) P_l(\cos \theta) \quad (180)$$

となる。これは次のようにして導かれる。

平面波  $e^{ikr \cos \theta}$  はポテンシャルのない Schrödinger 方程式の解 ( $E = k^2/2$ ) である。他方、 $j_l(kr)Y_{lm}(\theta, \varphi)$  も同じ固有値を持つ解であり、これは完全系を成す。従って、平面波はこれらの線型結合で表されるはずであり、 $\varphi$  依存性から  $m = 0$  のみ考えればよいので

$$e^{ikr \cos \theta} = \sum_l c_l j_l(kr) P_l(\cos \theta) \quad (181)$$

とおく。球ベッセル関数の  $r \rightarrow 0$  における漸近形 (76) から、 $j_l(kr)$  は  $r$  の  $l$  次項となる。対応する  $P_l(x)$  の  $l$  次項は、式 (157) より

$$\frac{1}{2^l l!} \left( \frac{d}{dx} \right)^l x^{2l} = \frac{(2l)!}{2^l (l!)^2} x^l \quad (182)$$

である。以上より、 $(kr \cos \theta)^l$  の項を比較すると

$$\frac{1}{l!} (ikr \cos \theta)^l = c_l \frac{2^l l! (kr)^l}{(2l+1)!} \frac{(2l)! \cdot \cos^l \theta}{2^l (l!)^2} = \frac{c_l}{(2l+1)l!} (kr \cos \theta)^l \quad \therefore c_l = i^l (2l+1) \quad (183)$$

となる。

次に、 $\mathbf{k}$  が任意の方向を向いている場合を考える。 $\mathbf{r}$  および  $\mathbf{k}$  の方向を  $(\theta, \varphi)$  および  $(\theta_k, \varphi_k)$  で表し、 $\mathbf{r}$  と  $\mathbf{k}$  の成す角を  $\omega$  で表すと、

$$e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} = e^{ikr \cos \omega} = \sum_l i^l (2l+1) j_l(kr) P_l(\cos \omega) \quad (184)$$

である。さらに、球面調和関数の加法定理

$$P_l(\cos \omega) = \frac{4\pi}{2l+1} \sum_m Y_{lm}^*(\theta_k, \varphi_k) Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad (185)$$

を用いると

$$e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} = 4\pi \sum_{lm} i^l j_l(kr) Y_{lm}^*(\theta_k, \varphi_k) Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad (186)$$

を得る。

## 参考文献

- [1] 西森 秀稔、「物理数学 II」、丸善出版、2015。
- [2] NIST Digital Library of Mathematical Functions, <https://dlmf.nist.gov> .
- [3] E. U. Condon and G. H. Shortley, “The Theory of Atomic Spectra”, Cambridge Univ. Press, 1999.
- [4] 猪木 慶治、川合 光、「量子力学 II」、講談社、2007。