光電子強度分布計算ソフト SPADExp
3. 動径波動関数のための特殊関数論

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 8 月 4 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。

$$\Gamma(x) = \int_0^\infty e^{-t} t^{x-1} \mathrm{d}t \tag{1}$$

1.2　性質

まず、$x = 1$ のとき

$$\Gamma(1) = \int_0^\infty e^{-t} \mathrm{d}t = 1 \tag{2}$$

である。次に、部分積分により

$$\begin{aligned}
\Gamma(x) &= \int_0^\infty e^{-t} t^{x-1} \mathrm{d}t & (3)\\
&= \left[-e^{-t} t^{x-1}\right]_0^\infty + (x-1)\int_0^\infty e^{-t} t^{x-2} \mathrm{d}t = (x-1)\Gamma(x-1) & (4)
\end{aligned}$$

が得られる。式 (2) と式 (4) から、x が正整数 n の場合

$$\Gamma(n) = (n-1)(n-2)\cdot 1 \cdot \Gamma(1) = (n-1)! \tag{5}$$

となる。

次に、x が半整数の場合を考える。

$$\begin{aligned}
\Gamma(1/2) &= \int_0^\infty e^{-t} t^{-1/2} \mathrm{d}t & (6)\\
&= 2\int_0^\infty e^{-u^2} \mathrm{d}u \ (t = u^2,\ \mathrm{d}t = 2u\mathrm{d}u) & (7)\\
&= \sqrt{\pi} & (8)
\end{aligned}$$

であることから、

$$\begin{aligned}
\Gamma(n+1/2) &= (n-1/2)(n-3/2)\cdot 1/2 \cdot \Gamma(1/2) & (9)\\
&= \frac{\dfrac{(2n-1)!}{(n-1)!\cdot 2^{n-1}}}{2^n}\sqrt{\pi} & (10)\\
&= \frac{(2n-1)!}{(n-1)!\cdot 2^{2n-1}}\sqrt{\pi} \quad (n \geq 1) & (11)
\end{aligned}$$

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

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

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、

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

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、

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

これを、Bessel 微分方程式

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

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

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} j_l(x) = x^{-1/2} \frac{\mathrm{d}f(x)}{\mathrm{d}x} - \frac{1}{2} x^{-3/2} f(x) \tag{16}$$

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

となり、代入して整理すると

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

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

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

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 ν 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

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

で級数展開する。

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

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

となることから、代入して整理すると

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

を得る。x^{c+j} の項を取り出すと、

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

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

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

$$c=\nu=1/2:\ J_\nu(x)=a_0x^{1/2}+X(5/2,1/2)a_0x^{5/2}+X(9/2,1/2)X(5/2,1/2)a_0x^{9/2}+\cdots \tag{26}$$

$$\begin{aligned} c=-\nu=-1/2:\ J_\nu(x)&=a_0x^{-1/2}+X(3/2,1/2)a_0x^{3/2}+X(7/2,1/2)X(3/2,1/2)a_0x^{7/2}\cdots\\ &+a_1x^{1/2}+X(5/2,1/2)a_1x^{5/2}+X(9/2,1/2)X(5/2,1/2)a_1x^{9/2}+\cdots \end{aligned} \tag{27}$$

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 $j=2k\ (k=0,\ 1,\ \cdots)$ となる偶数のときに非零の値を取る。ν 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。[*1]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、

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

であり、漸化式 (25) を用いて計算すると、

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

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

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

となる。ここで式 (4) を用いると

$$(\nu+k)\cdots(\nu+1)=\frac{\Gamma(\nu+k+1)}{\Gamma(\nu+1)} \tag{32}$$

となることから、

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

であり、さらに

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

[*1] ν 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 $a_0,\ \cdots,\ a_{2\nu-2}=0$ 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

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

となる。

$c = -\nu$ のときは、

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

となり、

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

である。

以上をまとめると、Bessel 方程式のふたつの解は

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

および $J_{-\nu}(x)$ である。

2.3 Neumann 関数

ν 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

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

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

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

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、

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\Big(x^{-\nu} J_\nu(x)\Big) = -x^{-\nu} J_{\nu+1}(x) \tag{41}$$

の漸化式を満たす。実際、級数展開を代入すると

$$\begin{aligned}
\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\Big(x^{-\nu} J_\nu(x)\Big) &= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{k! \cdot \Gamma(\nu + k + 1)} \frac{2k x^{2k-1}}{2^{2k+\nu}} &(42)\\
&= \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^k}{(k-1)! \cdot \Gamma(\nu + k + 1)} \frac{x^{2k-1}}{2^{2k+\nu-1}} \quad (k = 0 \text{ の項はゼロ}) &(43)\\
&= \sum_{K=0}^{\infty} \frac{-(-1)^K}{K! \cdot \Gamma(\nu + K + 2)} \frac{x^{2K+1}}{2^{2K+\nu+1}} \quad (K = k - 1) &(44)\\
&= -x^{-\nu} \sum_{K=0}^{\infty} \frac{(-1)^K}{K! \cdot \Gamma(\nu + K + 2)} \left(\frac{x}{2}\right)^{2K+\nu+1} &(45)\\
&= -x^{-\nu} J_{\nu+1}(x) &(46)
\end{aligned}$$

となっている。
また、

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\Big(x^\nu J_\nu(x)\Big) = x^\nu J_{\nu-1}(x) \tag{47}$$

の漸化式も満たす。級数展開を代入すると

$$\begin{aligned}
\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\Big(x^\nu J_\nu(x)\Big) &= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{k!\cdot\Gamma(\nu+k+1)} \frac{(2k+2\nu)x^{2k+2\nu-1}}{2^{2k+\nu}} && (48)\\
&= \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^k}{(k-1)!\cdot\Gamma(\nu+k)} \frac{x^{2k+2\nu-1}}{2^{2k+\nu-1}} \quad (\because \Gamma(\nu+k+1) = (\nu+k)\Gamma(\nu+k)) && (49)\\
&= x^\nu \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{k!\cdot\Gamma(\nu+k)} \left(\frac{x}{2}\right)^{2k+\nu-1} && (50)\\
&= x^\nu J_{\nu-1}(x) && (51)
\end{aligned}$$

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

$$\begin{aligned}
J_{1/2}(x) &= \sqrt{\frac{x}{2}} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{k!\cdot\Gamma(k+1+1/2)} \left(\frac{x}{2}\right)^{2k} && (52)\\
&= \sqrt{\frac{x}{2}} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k(k+1)!\cdot 2^{2k+2}}{k!\cdot(2k+2)!\cdot\sqrt{\pi}} \left(\frac{x}{2}\right)^{2k} \quad (\because (12)) && (53)\\
&= \sqrt{\frac{2}{\pi x}} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{(2k+1)!} x^{2k+1} = \sqrt{\frac{2}{\pi x}} \sin x && (54)
\end{aligned}$$

から、ν が正の半整数のときの Bessel 関数は

$$\begin{aligned}
J_{l+1/2}(x) &= -x^{l-1/2} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\Big(x^{-(l-1/2)} J_{l-1/2}(x)\Big) && (55)\\
&= -x^{l-1/2} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left(-\frac{1}{x}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\Big(x^{-(l-3/2)} J_{l-3/2}(x)\Big)\right) && (56)\\
&= (-1)^l x^{l+1/2} \left(\frac{1}{x}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)^l x^{-1/2} J_{1/2}(x) && (57)\\
&= \sqrt{\frac{2}{\pi}} (-1)^l x^{l+1/2} \left(\frac{1}{x}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)^l \frac{\sin x}{x} && (58)
\end{aligned}$$

であり、球 Bessel 関数は

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

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。

$$j_0(x) = \frac{\sin x}{x} \tag{60}$$
$$j_1(x) = \frac{\sin x - x\cos x}{x^2} \tag{61}$$
$$j_2(x) = \frac{(3-x^2)\sin x - 3x\cos x}{x^3} \tag{62}$$
$$j_3(x) = \frac{(15-6x^2)\sin x + (x^3-15x)\cos x}{x^4} \tag{63}$$
$$j_4(x) = \frac{(x^4-45x^2+105)\sin x + (10x^3-105x)\cos x}{x^5} \tag{64}$$

また、$\nu = -1/2$ での Bessel 関数

$$J_{-1/2}(x) = \sqrt{\frac{2}{x}}\sum_{k=0}^{\infty}\frac{(-1)^k}{k!\cdot\Gamma(k+1/2)}\left(\frac{x}{2}\right)^{2k} \tag{65}$$
$$= \sqrt{\frac{2}{x}}\sum_{k=0}^{\infty}\frac{(-1)^k k!\cdot 2^{2k}}{k!\cdot(2k)!\cdot\sqrt{\pi}}\left(\frac{x}{2}\right)^{2k} \quad (\because (12)) \tag{66}$$
$$= \sqrt{\frac{2}{\pi x}}\sum_{k=0}^{\infty}\frac{(-1)^k}{(2k)!}x^{2k} = \sqrt{\frac{2}{\pi x}}\cos x \tag{67}$$

から、ν が負の半整数のときの Bessel 関数は

$$J_{-l-1/2}(x) = x^{l-1/2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left(x^{-l+1/2)}J_{-l+1/2}(x)\right) \tag{68}$$
$$= x^{l-1/2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left(\frac{1}{x}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left(x^{-l+3/2)}J_{-l+3/2}(x)\right)\right) \tag{69}$$
$$= x^{l+1/2}\left(\frac{1}{x}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)^l x^{-1/2}J_{-1/2}(x) \tag{70}$$
$$= \sqrt{\frac{2}{\pi}}x^{l+1/2}\left(\frac{1}{x}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)^l\frac{\cos x}{x} \tag{71}$$

であり、球 Neumann 関数は

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

と表される。

2.6 漸近形

$x \to 0$ 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、

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

である。ここから、球 Bessel 関数の漸近形は

$$j_l(x) \sim \sqrt{\frac{\pi}{2x}}\left(\frac{x}{2}\right)^{l+1/2}\frac{1}{\Gamma(l+1+1/2)} \tag{74}$$
$$= \sqrt{\frac{\pi}{2x}}\left(\frac{x}{2}\right)^{l+1/2}\frac{(l+1)!\cdot 2^{2l+2}}{(2l+2)!\cdot\sqrt{\pi}} \quad (\because (12)) \tag{75}$$
$$= \frac{2^l l!}{(2l+1)!}x^l \tag{76}$$

と求められる。

$x \to \infty$ 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

$$j_l(x) \sim (-1)^l \frac{1}{x} \frac{\mathrm{d}^l}{\mathrm{d}x^l} \sin x \tag{77}$$
$$= \frac{1}{x} \frac{(-1)^l}{2i} \Big(i^l \mathrm{cis}(x) - (-i)^l \mathrm{cis}(-x) \Big) \tag{78}$$
$$= \frac{1}{x} \frac{\mathrm{cis}(x - l\pi/2) - \mathrm{cis}(-(x - l\pi/2))}{2i} \tag{79}$$
$$= \frac{\sin(x - l\pi/2)}{x} \tag{80}$$

であり、球 Neumann 関数の場合は

$$y_l(x) \sim (-1)^{l+1} \frac{1}{x} \frac{\mathrm{d}^l}{\mathrm{d}x^l} \cos x \tag{81}$$
$$= \frac{1}{x} \frac{(-1)^{l+1}}{2} \Big(i^l \mathrm{cis}(x) + (-i)^l \mathrm{cis}(-x) \Big) \tag{82}$$
$$= \frac{-1}{x} \frac{\mathrm{cis}(x - l\pi/2) + \mathrm{cis}(-(x - l\pi/2))}{2} \tag{83}$$
$$= -\frac{\cos(x - l\pi/2)}{x} \tag{84}$$

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

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

を得る。

まず、これを Whittaker 関数

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

に変換することを考える。$x = z/2i$ を用いると、

$$(85) \iff \left[-4\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}z^2} + 1 + \frac{4i}{kz} + \frac{4l(l+1)}{z^2} \right] f(z/2i) = 0 \tag{87}$$
$$\iff \left[\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}z^2} - \frac{1}{4} - \frac{i}{kz} + \frac{1/4 - (l+1/2)^2}{z^2} \right] f(z/2i) = 0 \tag{88}$$

となるので、

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

の対応関係が得られる。

次に、Whittaker 関数を合流型超幾何級数

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

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

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

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

より

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

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

となる。ここから、

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

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。

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

ここで、

$$(a)_s=a(a+1)\cdots(a+s-1),\ (a)_0=1 \tag{97}$$

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。今の場合は、

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

$$\psi(x)=\frac{1}{\Gamma(x)}\frac{\mathrm{d}\Gamma(x)}{\mathrm{d}x} \tag{99}$$

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 $z\to\infty$ における漸近形は、

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

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

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、

$$\begin{aligned} z^{a-b} &= (2ix)^{-(l+1)+i/k} && (102)\\ &= (2x)^{-(l+1)+i/k}\times\exp\left(\frac{\pi i}{2}\cdot(-(l+1)+i/k)\right) && (103)\\ &= (2x)^{-(l+1)}e^{-\pi/2k}\mathrm{cis}\left[\frac{\log(2x)}{k}-\frac{\pi(l+1)}{2}\right] && (104)\end{aligned}$$

$$\begin{aligned} z^{-a} &= (2ix)^{-(l+1)-i/k} && (105)\\ &= (2x)^{-(l+1)-i/k}\times\exp\left(\frac{\pi i}{2}\cdot(-(l+1)-i/k)\right) && (106)\\ &= (2x)^{-(l+1)}e^{\pi/2k}\mathrm{cis}\left[-\frac{\log(2x)}{k}-\frac{\pi(l+1)}{2}\right] && (107)\end{aligned}$$

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

$$\begin{aligned} &e^{-ix}(2ix)^{l+1}\left[\frac{\Gamma(2(l+1))}{\Gamma(l+1+i/k)}e^{2ix}(2x)^{-(l+1)}e^{-\pi/2k}\mathrm{cis}\left(\frac{\log(2x)}{k}-\frac{\pi(l+1)}{2}\right)\right.\\ &\qquad\left.+\frac{\Gamma(2(l+1))}{\Gamma(l+1-i/k)}e^{i\pi(l+1+i/k)}(2x)^{-(l+1)}e^{\pi/2k}\mathrm{cis}\left(-\frac{\log(2x)}{k}-\frac{\pi(l+1)}{2}\right)\right] && (108)\\ &= i^{l+1}(2l+1)!e^{-\pi/2k}\left[\frac{e^{ix}}{\Gamma(l+1+i/k)}\mathrm{cis}\left(\frac{\log(2x)}{k}-\frac{\pi(l+1)}{2}\right)\right.\\ &\qquad\left.+\frac{e^{-ix}}{\Gamma(l+1-i/k)}\mathrm{cis}\left(-\frac{\log(2x)}{k}+\frac{\pi(l+1)}{2}\right)\right] && (109)\\ &= \frac{(-i)i^{l+1}(2l+1)!e^{-\pi/2k}}{|\Gamma(l+1+i/k)|}\left[\mathrm{cis}\left(x+\frac{\log(2x)}{k}-\frac{l\pi}{2}+\arg\Gamma(l+1-i/k)\right)-\mathrm{c.c.}\right] && (110)\\ &= \frac{2\cdot i^{l+1}(2l+1)!e^{-\pi/2k}}{|\Gamma(l+1+i/k)|}\sin\left(x+\frac{\log(2x)}{k}-\frac{l\pi}{2}+\arg\Gamma(l+1-i/k)\right) && (111)\end{aligned}$$

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 $j_l(kr)\to\sin(kr-l\pi/2)/kr$ と対応するようにすると、$f(x)$ は

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

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

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、

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

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

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

を漸近形として持つ解の存在が分かる。

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

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

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

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

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

$$M(a,\ b,\ z)^* = M(a^*,\ b^*,\ z^*) \tag{118}$$

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

$$M(a,\ b,\ z) = e^z M(b-a,\ b,\ -x) \tag{119}$$

も用いると、

$$\begin{align} f_0^*(x) &= e^{ix}(2x)^{l+1}M(l+1-i/k,\ 2l+2,\ -2ix) \tag{120}\\ &= e^{ix}(2x)^{l+1}e^{-2ix}M(l+1+i/k,\ 2l+2,\ 2ix) \tag{121}\\ &= e^{-ix}(2x)^{l+1}M(l+1+i/k,\ 2l+2,\ 2ix) = f_0(x) \tag{122}\end{align}$$

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

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

距離 r に関する偏微分を用いた表式

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

を直交座標で表そうとすると、

$$\begin{align} f(r+\Delta r,\ \theta,\ \varphi) - f(r,\ \theta,\ \varphi) &= f(x+\Delta r\sin\theta\cos\varphi,\ y+\Delta r\sin\theta\sin\varphi,\ z+\Delta r\cos\theta) - f(x,\ y,\ z) \tag{125}\\ &= \Delta r\left[\sin\theta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial x} + \sin\theta\sin\varphi\frac{\partial}{\partial y} + \cos\theta\frac{\partial}{\partial z}\right] f(\mathbf{r}) \tag{126}\end{align}$$

となるので、

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

の関係がある。同様にして、

$$\begin{align} \frac{\partial}{\partial \theta} &= r\cos\theta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial x} + r\cos\theta\sin\varphi\frac{\partial}{\partial y} - r\sin\theta\frac{\partial}{\partial z} \tag{128}\\ \frac{\partial}{\partial \varphi} &= -r\sin\theta\sin\varphi\frac{\partial}{\partial x} + r\sin\theta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial y} \tag{129}\end{align}$$

の関係と、これらの逆変換

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

$$\frac{\partial}{\partial y} = \sin\theta\sin\varphi\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos\theta\sin\varphi}{r}\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{\cos\varphi}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi} \tag{131}$$

$$\frac{\partial}{\partial z} = \cos\theta\frac{\partial}{\partial r} - \frac{\sin\theta}{r}\frac{\partial}{\partial\theta} \tag{132}$$

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。

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

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

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

4.2 球面調和関数の導出

$\mathbf{L}^2$ および L_z の固有状態

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

$$L_z Y_{lm}(\theta,\ \varphi) = mY_{lm}(\theta,\ \varphi) \tag{137}$$

を求める。まず、式 (134) と式 (137) から球面調和関数を

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

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

と変数分離できる。規格化は、

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

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

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

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

$$L_+\Big(\Theta_{ll}(\theta)\Phi_l(\varphi)\Big) = 0 \tag{142}$$

$$\Longleftrightarrow \quad \left[\frac{\partial}{\partial\theta} - l\frac{\cos\theta}{\sin\theta}\right]\Theta_{ll}(\theta) = 0 \tag{143}$$

となるので、これを解いて

$$\Theta_{ll}(\theta) = (-1)^l\sqrt{\frac{(2l+1)!}{2}}\frac{1}{2^l l!}\sin^l\theta \tag{144}$$

となる。関数の規格化は、

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

$$\therefore I_l = \frac{2l}{2l+1}I_{l-1} \tag{146}$$

および $I_0 = 2$ より、

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

であることから行われ、$(-1)^l$ は後の便宜のためにつけた。

$\Theta_{ll}(\theta)$ が求まったら、昇降演算子の性質

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

によって Θ_{lm} を求められる。

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

より

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

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

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

が成り立つ。これを代入して

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

であり、繰り返して用いることで

$$\Theta_{lm}(\theta) = \sqrt{\frac{(l+m)!}{(2l)!(l-m)!}}\frac{1}{\sin^m\theta}\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)^{l-m}\sin^l\theta\cdot\Theta_{ll}(\theta) \tag{153}$$

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

を得る。前と同様の議論から、

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

も導出できる。

特に $m = 0$ のとき、

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

となる。ここで、

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

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

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

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

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。

$$P_0(x) = 1 \tag{160}$$
$$P_1(x) = x \tag{161}$$
$$P_2(x) = \frac{3}{2}x^2 - \frac{1}{2} \tag{162}$$
$$P_3(x) = \frac{5}{2}x^3 - \frac{3}{2}x \tag{163}$$
$$P_4(x) = \frac{35}{8}x^4 - \frac{15}{4}x^2 + \frac{3}{8} \tag{164}$$

$\Theta_{ll}(\theta)$ 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。

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

$$\Theta_{11}(\theta) = -\frac{\sqrt{3}}{2}\sin\theta \tag{166}$$
$$\Theta_{10}(\theta) = \sqrt{\frac{3}{2}}\cos\theta \tag{167}$$

$$\Theta_{22}(\theta) = \frac{\sqrt{15}}{4}\sin^2\theta \tag{168}$$
$$\Theta_{21}(\theta) = -\frac{\sqrt{15}}{2}\sin\theta\cos\theta \tag{169}$$
$$\Theta_{20}(\theta) = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{5}{2}}(3\cos^2\theta - 1) \tag{170}$$

$$\Theta_{33}(\theta) = -\frac{\sqrt{70}}{8}\sin^3\theta \tag{171}$$
$$\Theta_{32}(\theta) = \frac{\sqrt{105}}{4}\sin^2\theta\cos\theta \tag{172}$$
$$\Theta_{31}(\theta) = -\frac{\sqrt{42}}{8}(5\cos^2\theta - 1)\sin\theta \tag{173}$$
$$\Theta_{30}(\theta) = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{7}{2}}(5\cos^2\theta - 3)\cos\theta \tag{174}$$

$$\Theta_{44}(\theta) = \frac{3\sqrt{35}}{16}\sin^4\theta \tag{175}$$
$$\Theta_{43}(\theta) = -\frac{3\sqrt{70}}{8}\sin^3\theta\cos\theta \tag{176}$$
$$\Theta_{42}(\theta) = \frac{3\sqrt{5}}{8}(7\cos^2\theta - 1)\sin^2\theta \tag{177}$$
$$\Theta_{41}(\theta) = -\frac{3\sqrt{10}}{8}(7\cos^2\theta - 3)\sin\theta\cos\theta \tag{178}$$
$$\Theta_{40}(\theta) = \frac{3\sqrt{2}}{16}(35\cos^4\theta - 20\cos^2\theta + 3) \tag{179}$$

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

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

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、φ 依存性から $m = 0$ のみ考えればよいので

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

とおく。球ベッセル関数の $r \to 0$ 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

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

である。以上より、$(kr\cos\theta)^l$ の項を比較すると

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

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 ω で表すと、

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

である。さらに、球面調和関数の加法定理

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

を用いると

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

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。