

本節では、次節にて行う部分波展開について、数学的な準備を行う。最初に、以下で扱う演算子のクラスである Strum-Liouville 演算子についての性質を調べる。まず、Legendre 多項式と Legendre 陪多項式の性質を調べて、直交性を知る。次に、Bessel 微分方程式の解である Bessel 関数の表式を求めて、球 Bessel 関数と球 Neumann 関数、球 Hankel 関数を定義する。続いて、Legendre 多項式を用いて波動関数を展開して、展開係数 B_{ml} が満たすべき微分方程式を導く。最後に、展開係数 B_{ml} が球 Bessel 関数と球 Neumann 関数の線型結合で書けることを確かめて、線型結合の係数が波動関数を特徴づけるものだと知る。

0.0.1 Strum-Liouville 演算子の Hermite 性

$a < b$ として、 $x \in [a, b]$ で定義された関数空間 V を考える。 $\rho(x)$ を非負の実数関数として、 $f, g \in V$ に対して、

$$\langle f, g \rangle := \int_a^b f^*(x)g(x)\rho(x) dx \quad (0.0.1)$$

なる内積を入れる。関数空間 V 上の演算子として \mathcal{L} を、

$$\mathcal{L} := \frac{1}{\rho(x)} \left[\frac{d}{dx} \left\{ p(x) \frac{d}{dx} \right\} + q(x) \right] \quad (0.0.2)$$

とする。式 (0.0.2) なる形をした演算子を Strum-Liouville 演算子という。境界条件を、 $\forall f \in V$ について、

$$\begin{cases} f(a) = f(b) \\ p(a)f'(a) = p(b)f'(b) \end{cases} \quad (0.0.3)$$

とすると、

$$\langle f, \mathcal{L}g \rangle = \langle \mathcal{L}f, g \rangle \quad (0.0.4)$$

が成立する。式 (0.0.4) なる関係が成り立つ演算子 \mathcal{L} を Hermite 演算子という。

Proof. 内積の定義より、

$$\langle f, \mathcal{L}g \rangle = \int_a^b f^*(x) \frac{1}{\rho(x)} \left[\frac{d}{dx} \left\{ p(x) \frac{d}{dx} g(x) \right\} + q(x)g(x) \right] \rho(x) dx \quad (0.0.5)$$

$$= \int_a^b f^*(x) \left[\frac{d}{dx} \left\{ p(x) \frac{d}{dx} g(x) \right\} + q(x)g(x) \right] dx \quad (0.0.6)$$

$$= [f^*(x)g'(x)]_a^b - \int_a^b f'^*(x)p(x)g'(x) dx + \int_a^b f^*(x)q(x)g(x) dx \quad (0.0.7)$$

$$= [f^*(x)p(x)g'(x)]_a^b - [f'^*(x)p(x)g(x)]_a^b + \int_a^b g(x) \frac{1}{\rho(x)} \left[\frac{d}{dx} \left(p(x) \frac{d}{dx} f^*(x) \right) + q(x)f^*(x) \right] \rho(x) dx \quad (0.0.8)$$

$$= [f^*(x)p(x)g'(x)]_a^b - [f'^*(x)p(x)g(x)]_a^b + \langle g, \mathcal{L}f \rangle^* \quad (0.0.9)$$

$$= [f^*(x)p(x)g'(x)]_a^b - [g(x)p(x)f'^*(x)]_a^b + \langle \mathcal{L}f, g \rangle \quad (0.0.10)$$

となる。第1項と第2項について、第1項に $f(a) = f(b)$ を、第2項に $p(x)$ が実数値関数であり $p(a)f'(a) = p(b)f'(b)$ であることを用いると

$$[f^*(x)p(x)g'(x)]_a^b - [f'^*(x)p(x)g(x)]_a^b = \{p(b)g'(b) - p(a)f'(a)\}f^*(a) - \{g(b) - g(a)\}p(a)f'(a) \quad (0.0.11)$$

を得る。今度は、第1項に $p(x)$ が実数値関数であり $p(a)g'(a) = p(b)g'(b)$ であることを、第2項に $g(a) = g(b)$ を用いれば、

$$\langle f, \mathcal{L}g \rangle = \langle \mathcal{L}f, g \rangle \quad (0.0.12)$$

を得る。 □

0.0.2 Legendre 多項式

式 (0.0.2) において, $a = -b = 1$ とする. また,

$$\rho(x) := 1 \quad (0.0.13)$$

$$p(x) := 1 - x^2 \quad (0.0.14)$$

$$q(x) := -\frac{m^2}{1 - x^2}, \quad m \in \{0, 1, \dots\} \quad (0.0.15)$$

とすると,

$$\mathcal{L}_m = \frac{d}{dx} \left\{ (1 - x^2) \frac{d}{dx} \right\} - \frac{m^2}{1 - x^2} \quad (0.0.16)$$

となる. 関数の内積は,

$$\langle f, g \rangle = \int_{-1}^1 f^*(x) g(x) dx \quad (0.0.17)$$

と定義しておく. また, 境界条件は,

$$p(\pm 1) f^*(\pm 1) g'(\pm 1) = 0 \quad (0.0.18)$$

とする. これより, 演算子 \mathcal{L} が Hermite 演算子であると確かめられる. たとえば, $g'(x) = p(x)$ となるように $g(x)$ を定めれば, $f(1) = f(-1) = 0$ となる. また, $f(x) = 1$ となるように $f(x)$ を定めれば, $p(1)g'(1) = p(-1)g'(1) = 0$ となるので, 前節で示した境界条件を満足する. さて, Legendre 多項式 $P_n(x)$ は n を非負整数として,

$$\mathcal{L}_0 P_n(x) = -n(n+1) P_n(x) \quad (0.0.19)$$

$$\Leftrightarrow \frac{d}{dx} \left\{ (1 - x^2) \frac{d}{dx} P_n(x) \right\} = -n(n+1) P_n(x) \quad (0.0.20)$$

なる $P_n(x)$ のうち, $x = 0$ 周りで級数展開したもので,

$$P_n(x) = \sum_{j=0}^{\infty} u_j x^j \quad (0.0.21)$$

と書いたとき,

$$u_n = \frac{(2n)!}{2^n (n!)^2} \quad (0.0.22)$$

$$u_{n+1} = 0 \quad (0.0.23)$$

なるものである. 式 (0.0.21) を式 (0.0.20) に代入すると,

$$\frac{d}{dx} \left\{ (1 - x^2) \frac{d}{dx} \sum_{j=0}^{\infty} u_j x^j \right\} = -n(n+1) \sum_{j=0}^{\infty} u_j x^j \quad (0.0.24)$$

$$\Leftrightarrow \sum_{j=0}^{\infty} j u_j \frac{d}{dx} (x^{j-1} - x^{j+1}) = -n(n+1) \sum_{j=0}^{\infty} u_j x^j \quad (0.0.25)$$

$$\Leftrightarrow \sum_{j=0}^{\infty} j(j-1) u_j x^{j-2} - \sum_{j=0}^{\infty} j(j+1) u_j x^j = -n(n+1) \sum_{j=0}^{\infty} u_j x^j \quad (0.0.26)$$

$$\Leftrightarrow \sum_{j=0}^{\infty} j(j-1) u_j x^{j-2} = \sum_{j=0}^{\infty} u_j [j(j+1) - n(n+1)] x^j \quad (0.0.27)$$

$$\Leftrightarrow \sum_{j=2}^{\infty} j(j-1) u_j x^{j-2} = \sum_{j=0}^{\infty} u_j [j(j+1) - n(n+1)] x^j \quad (0.0.28)$$

$$\Leftrightarrow \sum_{j=0}^{\infty} (j+1)(j+2)u_{j+2}x^j = \sum_{j=0}^{\infty} u_j[j(j+1) - n(n+1)]x^j \quad (0.0.29)$$

となるから,

$$(j+1)(j+2)u_{j+2} = [j(j+1) - n(n+1)]u_j \quad (0.0.30)$$

なる漸化式が成立する. 式 (0.0.30) において $j = n$ を代入すると, $u_{n+2} = 0$ となる. また, $j = n+1$ を代入すると式 (0.0.23) より $u_{n+1} = 0$ である. よって,

$$0 = u_{n+1} = u_{n+2} = u_{n+3} = u_{n+4} = \cdots \quad (0.0.31)$$

となる. また, 式 (0.0.30) に $j = n-2$ を代入すると,

$$u_{n-2} = -\frac{n(n-1)}{2(2n-1)}u_n \quad (0.0.32)$$

となる. よって, 式 (0.0.22) と式 (0.0.32) を用いて式 (0.0.21) を表すと,

$$P_n(x) = \frac{(2n)!}{2^n(n!)^2} \left[x^n - \frac{n(n-1)}{2(2n-1)}x^{n-2} + \frac{n(n-1)(n-2)(n-3)}{2 \cdot 4 \cdot (2n-1)(2n-3)}x^{n-4} + \cdots \right] \quad (0.0.33)$$

$$= \sum_{s=0}^{\lfloor n/2 \rfloor} (-1)^s \frac{(2n-2s)!}{2^n s!(n-s)!(n-2s)!} x^{n-2s} \quad (0.0.34)$$

となる. なお, Legendre 多項式は,

$$\frac{d^n}{dx^n} (x^2 - 1)^n = \sum_{s=0}^n \frac{d^n}{dx^n} (-1)^s \binom{n}{s} x^{2n-2s} \quad (0.0.35)$$

$$= \sum_{s=0}^{\lfloor n/2 \rfloor} (-1)^s \frac{n!}{s!(n-s)!} \frac{(2n-2s)!}{(n-2s)!} \quad (0.0.36)$$

なる関係を用いると,

$$P_n(x) = \frac{1}{2^n n!} \frac{d^n}{dx^n} (x^2 - 1)^n \quad (0.0.37)$$

となる. なお, 式 (0.0.37) は Rodrigues の公式として知られている.

0.0.3 Legendre 陪多項式

Legendre 陪多項式 $P_n^m(x)$ は $m \leq n$ として,

$$P_n^m(x) := (1-x^2)^{m/2} \frac{d^m}{dx^m} P_n(x) \quad (0.0.38)$$

と定義されて, 式 (0.0.37) を用いれば,

$$P_n^m(x) = (1-x^2)^{m/2} \frac{d^m}{dx^m} P_n(x) \quad (0.0.39)$$

$$= (1-x^2)^{m/2} \frac{d^m}{dx^m} \frac{1}{2^n n!} \frac{d^n}{dx^n} (x^2 - 1)^n \quad (0.0.40)$$

$$= \frac{1}{2^n n!} (1-x^2)^{m/2} \frac{d^{n+m}}{dx^{n+m}} (x^2 - 1)^n \quad (0.0.41)$$

となる. また, P_n^m は Legendre の陪微分方程式,

$$\mathcal{L}_m P_n^m(x) + n(n+1)P_n^m(x) = 0 \quad (0.0.42)$$

を満たす. Legendre 陪多項式の直交性は \mathcal{L}_m が Hermite 演算子であり, その固有関数である $P_n^m(x)$ が直交することより従う. 自分自身との内積, つまり, $\langle P_n^m(x), P_n^m(x) \rangle$ の値を計算する. 式 (0.0.41) を用いて, 式 (0.0.17) で示した内積の定義に従って計算する. $n + m$ 回部分積分を行うと,

$$\langle P_n^m(x), P_n^m(x) \rangle = \int_{-1}^1 \frac{1}{2^{2n}(n!)^2} (1-x^2)^m \left\{ \frac{d^{n+m}}{dx^{n+m}} (x^2-1)^m \right\} \left\{ \frac{d^{n+m}}{dx^{n+m}} (x^2-1)^m \right\} dx \quad (0.0.43)$$

$$= \frac{1}{2^{2n}(n!)^2} \int_{-1}^1 (1-x^2)^m \left\{ \frac{d^{n+m}}{dx^{n+m}} (x^2-1)^m \right\} \frac{d}{dx} \left\{ \frac{d^{n+m-1}}{dx^{n+m-1}} (x^2-1)^m \right\} dx \quad (0.0.44)$$

$$= \frac{1}{2^{2n}(n!)^2} \left[(1-x^2)^m \left\{ \frac{d^{n+m}}{dx^{n+m}} (x^2-1)^m \right\} \left\{ \frac{d^{n+m-1}}{dx^{n+m-1}} (x^2-1)^m \right\} \right]_{-1}^1 \quad (0.0.45)$$

$$- \frac{1}{2^{2n}(n!)^2} \int_{-1}^1 \left\{ \frac{d}{dx} (1-x^2)^m \left\{ \frac{d^{n+m}}{dx^{n+m}} (x^2-1)^m \right\} \right\} \left\{ \frac{d^{n+m+1}}{dx^{n+m+1}} (x^2-1)^m \right\} dx \quad (0.0.46)$$

$$= -\frac{1}{2^{2n}(n!)^2} \int_{-1}^1 \left\{ \frac{d}{dx} (1-x^2)^m \left\{ \frac{d^{n+m}}{dx^{n+m}} (x^2-1)^m \right\} \right\} \left\{ \frac{d^{n+m+1}}{dx^{n+m+1}} (x^2-1)^m \right\} dx \quad (0.0.47)$$

$$= \dots \quad (0.0.48)$$

$$= \frac{(-1)^{n+m}}{2^{2n}(n!)^2} \int_{-1}^1 (x^2-1)^n \left\{ \frac{d^{n+m}}{dx^{n+m}} (1-x^2)^m \left\{ \frac{d^{n+m}}{dx^{n+m}} (x^2-1)^n \right\} \right\} dx \quad (0.0.49)$$

$$= \frac{(-1)^{n+m}}{2^{2n}(n!)^2} \int_{-1}^1 (x^2-1)^n \left[\sum_{k=0}^{n+m} \binom{n+m}{k} \left\{ \frac{d^{n+m-k}}{dx^{n+m-k}} (1-x^2)^m \right\} \left\{ \frac{d^{n+m+k}}{dx^{n+m+k}} (x^2-1)^n \right\} \right] dx \quad (0.0.50)$$

となる. 最終行で Leibniz の公式を用いた. 式 (0.0.50) の和の中の $n + m - k$ 階微分と $n + m + k$ 階微分を考える. $(1-x^2)^m$ と $(x^2-1)^n$ の最高次数は, それぞれ $2m$ と $2n$ であるから, $2m \geq n + m - k$ かつ $2n \geq n + m + k$ なる k でのみ和の中は 0 でなくなる. つまり, $n - m \leq k$ かつ $n - m \geq k$ なる k は $k = n - m$ のみである. よって, 式 (0.0.50) は,

$$\langle P_n^m(x), P_n^m(x) \rangle = \frac{(-1)^{n+m}}{2^{2n}(n!)^2} \int_{-1}^1 (x^2-1)^n \left[\sum_{k=0}^{n+m} \binom{n+m}{k} \left\{ \frac{d^{n+m-k}}{dx^{n+m-k}} (1-x^2)^m \right\} \left\{ \frac{d^{n+m+k}}{dx^{n+m+k}} (x^2-1)^n \right\} \right] dx \quad (0.0.51)$$

$$= \frac{(-1)^{n+m}}{2^{2n}(n!)^2} \int_{-1}^1 (x^2-1)^n \left[\binom{n+m}{n-m} \left\{ \frac{d^{2m}}{dx^{2m}} (1-x^2)^m \right\} \left\{ \frac{d^{2n}}{dx^{2n}} (x^2-1)^n \right\} \right] dx \quad (0.0.52)$$

$$= \frac{(-1)^{n+m}}{2^{2n}(n!)^2} (-1)^m (2m)!(2n)! \frac{(n+m)!}{(n-m)!(2m)!} \int_{-1}^1 (x^2-1)^n dx \quad (0.0.53)$$

積分は, $x = \cos \theta$ と置換すると,

$$\int_{-1}^1 (x^2-1)^n dx = (-1)^n \int_{-1}^1 \sin^{2n+1} \theta d\theta \quad (0.0.54)$$

となる. I_{2n+1} を,

$$I_{2n+1} := \int_0^\pi \sin^{2n+1} \theta d\theta \quad (0.0.55)$$

と定義すると,

$$I_{2n+1} = \int_0^\pi \sin^{2n} \theta \frac{d}{d\theta} (-\cos \theta) d\theta \quad (0.0.56)$$

$$= [\sin^{2n} \theta \cdot (-\cos \theta)]_0^\pi + 2n \int_0^\pi \sin^{2n-1} \theta \cos^2 \theta d\theta \quad (0.0.57)$$

$$= 2n I_{2n-1} - 2n I_{2n+1} \quad (0.0.58)$$

となるので,

$$I_{2n+1} = \frac{2n}{2n+1} I_{2n-1} \quad (0.0.59)$$

$$= \frac{2n}{2n+1} \frac{2n-2}{2n-1} I_{2n-3} \quad (0.0.60)$$

$$= \dots \quad (0.0.61)$$

$$= \frac{(2n)!!}{(2n+1)!!} I_1 \quad (0.0.62)$$

$$= 2 \frac{(2n)!!}{(2n+1)!!} \quad (0.0.63)$$

$$= 2 \cdot 2^n n! \cdot \frac{2^n n!}{(2n+1)!} \quad (0.0.64)$$

となる. 2重階乗について,

$$(2n)!! = 2^n n! \quad (0.0.65)$$

$$(2n+1)!! = \frac{(2n+1)!}{(2n)!!} = \frac{(2n+1)!}{2^n n!} \quad (0.0.66)$$

なる関係が成り立つことを用いると,

$$\langle P_n^m(x), P_n^m(x) \rangle = \frac{(-1)^{n+m}}{2^{2n} (n!)^2} (-1)^m (2m)! (2n)! \frac{(n+m)!}{(n-m)! (2m)!} (-1)^n 2 \frac{(2n)!!}{(2n+1)!!} \quad (0.0.67)$$

$$= \frac{(-1)^{n+m}}{2^{2n} (n!)^2} (-1)^m (2m)! (2n)! \frac{(n+m)!}{(n-m)! (2m)!} (-1)^n 2 \cdot 2^n n! \cdot \frac{2^n n!}{(2n+1)!} \quad (0.0.68)$$

$$= \frac{2}{2n+1} \frac{(n+m)!}{(n-m)!} \quad (0.0.69)$$

となる. Legendre 多項式の直交性とまとめて書くと,

$$\langle P_n^m(x), P_n^m(x) \rangle = \delta_n^{n'} \frac{2}{2n+1} \frac{(n+m)!}{(n-m)!} \quad (0.0.70)$$

となる.

0.0.4 Bessel 関数

Legendre 陪多項式を考えていたときとは別の Sturm-Liouville 演算子を考える. 式 (0.0.2) において, $a \rightarrow 0$, $b \rightarrow a$ とする. また,

$$\rho(z) := x \quad (0.0.71)$$

$$p(z) := x \quad (0.0.72)$$

$$q(z) := -\frac{\nu^2}{z}, \quad \nu \geq 0 \quad (0.0.73)$$

とする. すなわち,

$$\mathcal{L}_\nu = \frac{1}{z} \left[\frac{d}{dz} \left\{ z \frac{d}{dz} \right\} - \frac{\nu^2}{z} \right] \quad (0.0.74)$$

$$\langle f, g \rangle = \int_0^a f^*(z) g(z) x \, dz \quad (0.0.75)$$

である. さて,

$$\mathcal{L}_\nu J_\nu(z) = -J_\nu(z) \quad (0.0.76)$$

$$\Leftrightarrow \left(\frac{d^2}{dz^2} + \frac{1}{z} \frac{d}{dz} + 1 - \frac{\nu^2}{z^2} \right) = 0 \quad (0.0.77)$$

$$\Leftrightarrow \frac{d^2}{dz^2} J_\nu(z) + \frac{1}{z} \frac{d}{dz} J_\nu(z) - \frac{\nu^2}{z^2} J_\nu(z) = J_\nu(z) \quad (0.0.78)$$

なる $J_\nu(z)$ を考える. 1 階微分の項と微分をしない項は $z=0$ で発散するが, それぞれ z と z^2 をかければ発散しないので確定特異点である. このとき, $z=0$ の周りで $J_\nu(z)$ を指数 α の Frobenius 展開をすると,

$$J_\nu(z) = z^\alpha \sum_n u_n z^n \quad (0.0.79)$$

となる. ただし, 計算の簡単のために $n < 0$ なる任意の n に対して $u_n = 0$ と定めた. また, $u_0 \neq 0$ とする. 式 (0.0.79) を式 (0.0.78) に代入することを考える. $J_\nu(z)$ の 1 階微分と 2 階微分が,

$$\frac{d}{dz} J_\nu(z) = \sum_n (n + \alpha) u_n z^{n+\alpha-1} \quad (0.0.80)$$

$$\frac{d^2}{dz^2} J_\nu(z) = \sum_n (n + \alpha)(n + \alpha - 1) u_n z^{n+\alpha-2} \quad (0.0.81)$$

と書けることを用いると,

$$\sum_n [(n + \alpha)(n + \alpha - 1) + (n + \alpha) - \nu^2] u_n z^{n+\alpha-2} = - \sum_n u_n z^{n+\alpha} \quad (0.0.82)$$

$$\Leftrightarrow \sum_n [(n + \alpha)(n + \alpha - 1) + (n + \alpha) - \nu^2] u_n z^{n+\alpha-2} = - \sum_n u_{n-2} z^{n+\alpha-2} \quad (0.0.83)$$

となる. 係数を比較すると,

$$[(n + \alpha)^2 - \nu^2] u_n = -u_{n-2} \quad (0.0.84)$$

となる. 式 (0.0.84) に $n = 1$ を代入すると $u_{-1} = 0$ より,

$$0 = u_1 = u_3 = \dots \quad (0.0.85)$$

を得る. また, $n = 0$ を代入すると $u_0 \neq 0$ より,

$$(0 + \alpha)^2 - \nu^2 = 0 \quad (0.0.86)$$

$$\Rightarrow \alpha = \pm \nu \quad (0.0.87)$$

となる. $\alpha = \nu$ を採用して式 (0.0.84) を用いると,

$$u_{n+2} = - \frac{1}{(n + \nu + 2)^2 - \nu^2} u_n \quad (0.0.88)$$

を得る. $\nu \in \mathbb{Z}$ のときは,

$$J_\nu(z) = u_0 z^\nu \left(1 - \frac{1}{2(2\nu + 2)} z^2 + \frac{1}{2 \cdot 4(2\nu + 2)(2\nu + 4)} z^4 + \dots + (-1)^n \frac{(2\nu)!!}{(2n)!!(2\nu + 2n)!!} z^{2n} + \dots \right) \quad (0.0.89)$$

$$= u_0 z^\nu \sum_{n=0} (-1)^n \frac{2^\nu \nu!}{2^n n! (\nu + n)! 2^{\nu+n}} z^{2n} \quad (0.0.90)$$

$$= u_0 \nu! 2^\nu \sum_{n=0} \frac{1}{n! (\nu + n)!} \left(\frac{z}{2} \right)^{\nu+2n} \quad (0.0.91)$$

となる. $\nu \notin \mathbb{Z}$ のときも, 表せるようにガンマ関数をもちいて一般化する. 式 (0.0.78) の形より, 明らかに定数倍が許容されるから,

$$u_0 = \frac{1}{2^\nu \Gamma(\nu + 1)} \quad (0.0.92)$$

となるように u_0 を定めておくと,

$$J_\nu(z) = \sum_n \frac{(-1)^n}{n! \Gamma(\nu + k + 1)} \left(\frac{z}{2}\right)^{\nu+2n} \quad (0.0.93)$$

を得る. $J_\nu(z)$ を Bessel 関数という. また, $\alpha = -\nu$ を採用したときは,

$$J_{-\nu}(z) = \sum_n \frac{(-1)^n}{n! \Gamma(-\nu + k + 1)} \left(\frac{z}{2}\right)^{-\nu+2n} \quad (0.0.94)$$

となり, これは $\nu \notin \mathbb{Z}$ のときに $J_\nu(z)$ と独立な解となることが示せる. $J_{-\nu}(z)$ を Neumann 関数という. 得られた Bessel 関数と Neumann 関数を用いて,

$$j_n(z) := \sqrt{\frac{\pi}{2z}} J_{n+\frac{1}{2}}(z) \quad (0.0.95)$$

$$y_n(z) := (-1)^{n+1} \sqrt{\frac{\pi}{2z}} J_{-n-\frac{1}{2}}(z) \quad (0.0.96)$$

$$(0.0.97)$$

を定義する. $j_n(z)$ と $y_n(z)$ はそれぞれ, 球 Bessel 関数, 球 Neumann 関数という. さらに, 球 Bessel 関数と球 Neumann 関数を用いて,

$$h_n^{(1)}(z) := j_n(z) + i y_n(z) \quad (0.0.98)$$

$$h_n^{(2)}(z) := j_n(z) - i y_n(z) \quad (0.0.99)$$

を定義する. $h_n^{(1)}$ と $h_n^{(2)}$ はそれぞれ, 第 1 種 Hankel 関数, 第 2 種 Hankel 関数という.

0.0.5 Helmholtz 方程式

Helmholtz 方程式,

$$(\nabla^2 + \kappa^2)u(r, \theta, \phi) = 0 \quad (0.0.100)$$

を考える. $u(\mathbf{r})$ を直交基底である $e^{im\phi}$ で展開すると,

$$A_m(r, \theta) := \int_0^{2\pi} u(r, \theta, \phi) e^{-im\phi} d\phi \quad (0.0.101)$$

$$u(r, \theta, \phi) = \sum_m A_m(r, \theta) e^{im\phi} \quad (0.0.102)$$

$$(0.0.103)$$

となる. また, 極座標ラプラシアンは,

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \quad (0.0.104)$$

である. 式 (0.0.100) に式 (0.0.104) を用いて, 式 (0.0.102) を代入すると,

$$\begin{aligned} & \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \sum_m A_m(r, \theta) e^{im\phi} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \sum_m A_m(r, \theta) e^{im\phi} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \sum_m A_m(r, \theta) e^{im\phi} \\ & + \kappa^2 \sum_m A_m(r, \theta) e^{im\phi} = 0 \end{aligned} \quad (0.0.105)$$

$$\Leftrightarrow \sum_m e^{im\phi} \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} A_m(r, \theta) \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} A_m(r, \theta) \right) - \frac{m^2}{r^2 \sin^2 \theta} A_m(r, \theta) + \kappa^2 A_m(r, \theta) \right] = 0 \quad (0.0.106)$$

となる．式 (0.0.106) に左から $\int_0^{2\pi} d\phi e^{-im\phi}$ をかける，すなわち， $e^{im\phi}$ に射影すると，

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} A_m(r, \theta) \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} A_m(r, \theta) \right) - \frac{m^2}{r^2 \sin^2 \theta} A_m(r, \theta) + \kappa^2 A_m(r, \theta) = 0 \quad (0.0.107)$$

を得る．Legendre 陪多項式を定義するときに用いた \mathcal{L}_m において， $x = \cos \theta$ とすると，

$$\mathcal{L}_m = \frac{d}{dx} \left\{ (1 - \cos^2 \theta) \frac{d}{dx} \right\} - \frac{m^2}{1 - \cos^2 \theta} \quad (0.0.108)$$

$$= \frac{d}{dx} \left\{ \sin^2 \theta \frac{d}{dx} \right\} - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} \quad (0.0.109)$$

$$= \frac{d\theta}{dx} \frac{d}{dx} \left\{ \sin^2 \theta \frac{d\theta}{dx} \frac{d}{dx} \right\} - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} \quad (0.0.110)$$

$$= -\frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{dx} \left\{ \sin^2 \theta \left(-\frac{1}{\sin \theta} \right) \right\} - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} \quad (0.0.111)$$

$$= \frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{dx} \left\{ \sin \theta \frac{d}{d\theta} \right\} - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} \quad (0.0.112)$$

であるから，式 (0.0.107) は，

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} A_m(r, \theta) \right) + \frac{1}{r^2} \mathcal{L}_{|m|} A_m(r, \theta) + \kappa^2 A_m(r, \theta) = 0 \quad (0.0.113)$$

となる．

続いて， $A_m(r, \theta)$ を直交基底である Legendre 陪多項式を用いて，

$$A_m(r, \theta) = \sum_{n=|m|}^{\infty} B_{nm}(r) P_n^{|m|}(\cos \theta) \quad (0.0.114)$$

と展開する．式 (0.0.113) の両辺に $P_n^{|m|}(\cos \theta)$ との内積をとる．式 (0.0.70) より，

$$\langle P_n^m(\cos \theta), P_n^m(\cos \theta) \rangle = \delta_n^{n'} \frac{2}{2n+1} \frac{(n+m)!}{(n-m)!} \quad (0.0.115)$$

であることと，式 (0.0.42) より，

$$\mathcal{L}_m P_n^m(x) + n(n+1) P_n^m(x) = 0 \quad (0.0.116)$$

であることを用いれば，

$$\left\langle P_n^m(\cos \theta), \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} A_m(r, \theta) \right) + \frac{1}{r^2} \mathcal{L}_{|m|} A_m(r, \theta) + \kappa^2 A_m(r, \theta) \right\rangle = 0 \quad (0.0.117)$$

$$\Leftrightarrow \frac{1}{r^2} \left\langle P_n^m(\cos \theta), \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} A_m(r, \theta) \right) \right\rangle + \frac{1}{r^2} \langle P_n^m(\cos \theta), \mathcal{L}_{|m|} A_m(r, \theta) \rangle + \langle P_n^m(\cos \theta), \kappa^2 A_m(r, \theta) \rangle = 0 \quad (0.0.118)$$

$$\Leftrightarrow \frac{1}{r^2} \left\{ \frac{d}{dr} r^2 \left\{ \frac{d}{dr} B_{nm}(r) \right\} \right\} \langle P_n^m(\cos \theta), P_n^m(\cos \theta) \rangle + \frac{1}{r^2} B_{nm}(r) \langle P_n^m(\cos \theta), \mathcal{L}_{|m|} P_n^m(\cos \theta) \rangle + \kappa^2 B_{nm}(r) \langle P_n^m(\cos \theta), P_n^m(\cos \theta) \rangle = 0 \quad (0.0.119)$$

$$\Leftrightarrow \left(\frac{1}{r^2} \left\{ \frac{d}{dr} r^2 \left\{ \frac{d}{dr} B_{nm}(r) \right\} \right\} - \frac{1}{r^2} n(n+1) B_{nm}(r) + \kappa^2 B_{nm}(r) \right) \langle P_n^m(\cos \theta), P_n^m(\cos \theta) \rangle = 0 \quad (0.0.120)$$

$$\Rightarrow \frac{1}{r^2} \left\{ \frac{d}{dr} r^2 \left\{ \frac{d}{dr} B_{nm}(r) \right\} \right\} - \frac{1}{r^2} n(n+1) B_{nm}(r) + \kappa^2 B_{nm}(r) = 0 \quad (0.0.121)$$

を得る．

式 (0.0.121) において，

$$\rho := \kappa r \quad (0.0.122)$$

と変数変換して,

$$C_{nm}(\rho) := \sqrt{\rho} B_{nm}(r) \quad (0.0.123)$$

と定義して代入すれば,

$$\left\{ \frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} + 1 - \frac{1}{\rho^2} \left(n + \frac{1}{2} \right)^2 \right\} C_{nm}(\rho) = 0 \quad (0.0.124)$$

を得る. 式 (0.0.124) と式 (0.0.77) である,

$$\mathcal{L}_\nu J_\nu(z) = -J_\nu(z) \quad (0.0.125)$$

$$\Leftrightarrow \left(\frac{d^2}{dz^2} + \frac{1}{z} \frac{d}{dz} + 1 - \frac{\nu^2}{z^2} \right) = 0 \quad (0.0.126)$$

を比べると, 式 (0.0.126) において,

$$z \rightarrow x \quad (0.0.127)$$

$$\nu = n + \frac{1}{2} \quad (0.0.128)$$

としたものであると分かる. つまり, $C_{nm}(\rho)$ は Bessel 関数 $J_{n+\frac{1}{2}}(\rho)$ と Neumann 関数 $J_{-n-\frac{1}{2}}(\rho)$ の線型結合で書かれるので, 係数をそれぞれ a'_{nm} , b'_{nm} として,

$$C_{nm}(\rho) = a'_{nm} J_{n+\frac{1}{2}}(\rho) + b'_{nm} J_{-n-\frac{1}{2}}(\rho) \quad (0.0.129)$$

と書く. 今後の変形のために, 球 Bessel 関数 $j_n(\rho)$ と球 Neumann 関数 $y_n(\rho)$ を用いて式 (0.0.129) を書き直せば,

$$C_{nm}(\rho) = a'_{nm} J_{n+\frac{1}{2}}(\rho) + b'_{nm} J_{-n-\frac{1}{2}}(\rho) \quad (0.0.130)$$

$$= \sqrt{\frac{2\rho}{\pi}} a'_{nm} \pi^{-1} j_n(\rho) + \sqrt{\frac{2\rho}{\pi}} b'_{nm} y_n(\rho) \quad (0.0.131)$$

$$= \sqrt{\rho} [a_{nm} j_n(\rho) + b_{nm} y_n(\rho)] \quad (0.0.132)$$

である. ただし,

$$a_{nm} := a'_{nm} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \quad (0.0.133)$$

$$b_{nm} := b'_{nm} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \quad (0.0.134)$$

と定めた.

さて, 今 Helmholtz 方程式の解の基底展開を行っているのであった. 今までに定義した展開を全てまとめると,

$$\text{式 (0.0.102) より } u(r, \theta, \phi) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} A_m(r, \theta) e^{im\phi} \quad (0.0.135)$$

$$\text{式 (0.0.114) より } A_m(r, \theta) = \sum_{n=|m|}^{\infty} B_{nm}(r) P_n^{|m|}(\cos \theta) \quad (0.0.136)$$

$$\text{式 (0.0.122) より } \rho = \kappa r \quad (0.0.137)$$

$$\text{式 (0.0.123) より } B_{nm}(r) = \frac{1}{\sqrt{\rho}} C_{nm}(\rho) \quad (0.0.138)$$

$$\text{式 (0.0.132) より } C_{nm}(\rho) = \sqrt{\rho} [a_{nm} j_n(\rho) + b_{nm} y_n(\rho)] \quad (0.0.139)$$

となる. 下から上に全て代入して整理すると,

$$u(r, \theta, \phi) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \sum_{n=|m|}^{\infty} [a_{nm} j_n(\kappa r) + b_{nm} y_n(\kappa r)] P_n^{|m|}(\cos \theta) e^{im\phi} \quad (0.0.140)$$

となる．今後の計算を行うとき，

$$\langle e^{im'\phi}, e^{im\phi} \rangle = 2\pi \delta_m^{m'} \quad (0.0.141)$$

$$\langle P_{n'}^m(x), P_n^m(x) \rangle = \delta_n^{n'} \frac{2}{2n+1} \frac{(n+m)!}{(n-m)!} \quad (0.0.142)$$

となっているのはいささか都合が悪いので，球面分布関数 $Y_{nm}(\theta, \phi)$ を，

$$Y_{nm}(\theta, \phi) := (-1)^m \left(\frac{1}{2\pi} \right)^{1/2} \left(\frac{2n+1}{2} \frac{(n-m)!}{(n+m)!} \right) P_n^m(x) e^{im\phi} \quad (0.0.143)$$

$$= (-1)^m \sqrt{\frac{2n+1}{4\pi} \frac{(n-m)!}{(n+m)!}} P_n^m(x) e^{im\phi} \quad (0.0.144)$$

として定義しておく．球面分布関数を用いて式 (0.0.140) を書き換えれば，

$$u(r, \theta, \phi) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \sum_{n=|m|}^{\infty} [a_{nm} j_n(\kappa r) + b_{nm} y_n(\kappa r)] (-1)^m \sqrt{\frac{2n+1}{4\pi} \frac{(n-m)!}{(n+m)!}} P_n^m(x) e^{im\phi} \quad (0.0.145)$$

となる．定数倍は a_{nm} や b_{nm} で吸収することにする．

