

となり

$$\ell_A = \ell_B = \frac{1}{2}k \quad (\text{I.75})$$

が得られ、 $k = 2\ell_A = 2\ell_B$ が非負の整数に量子化されることが見て取れる。また、 k を固定したときの独立な状態の数は

$$(2\ell_A + 1)(2\ell_B + 1) = (k + 1)^2 \quad (\text{I.76})$$

と計算され、前節の結果とたしかに一致している。

J 球ベッセル関数と3次元井戸型ポテンシャル

J.1 球ベッセル関数

3次元自由粒子の波動関数を球座標で表示することを考える。このときに表れる動径波動関数が満たす微分方程式（動径方程式）

$$\left[\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{d}{d\rho} - \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2} + 1 \right] R_\ell = 0 \quad (\text{J.1})$$

を考えよう。ここで ℓ はゼロまたは正の整数。式(J.1)の導出については、本文の式(8.43)の直前の議論を参照のこと。

まず、この微分方程式の解の $\rho \ll 1$ の領域を級数展開で調べる。微分方程式(J.1)は、 $\rho = 0$ で確定特異点を持つので

$$R_\ell(\rho) = \rho^s \sum_{k=0}^{\infty} a_k \rho^k \quad (\text{J.2})$$

と展開可能である。フロベニウスの方法での決定方程式を解くことで冪 s は求められ、その結果は

$$s = \ell, -\ell - 1 \quad (\text{J.3})$$

である。つまり、 $\rho = 0$ ($r = 0$) 近傍で、

$$R_\ell \sim \rho^\ell, \quad (\text{J.4})$$

と

$$R_\ell \sim \frac{1}{\rho^{\ell+1}} \quad (\text{J.5})$$

の2種の解が存在している。式(J.4)の解を原点で正則な解、式(J.5)の解を正則でない解と呼ぶ。平面波の場合と同様、自由粒子を取り扱う場合は、(系を適当な有限領域に限って定義しないかぎり) 波動関数の二乗可積分条件を課することができないことに注意しておく。

動径波動関数 R_ℓ のふるまいをより精密に決定するためには、級数展開(J.2)での係数 a_k の漸化式を解けばよい。微分方程式(J.1)は、 $\rho = 0$ の確定特異点を除いて ρ の有限領域には特異点が存在していない。このような場合の2階微分方程式の解は、合流型超幾何関数の理論を使って記述できることが知られている。ただ、球面波の微分方程式(J.1)の場合は、初等関数の知識だけを使って解を得ることも可能である。この節では、超幾何関数や合流型超幾何関数の議論は省略し、初等関数の知識だけを使った解の導出方法を紹介する。

そのために

$$R_\ell(\rho) = (-\rho)^\ell \chi_\ell(\rho) \quad (\text{J.6})$$

なる関数 χ_ℓ を導入する。動径方程式 (J.1) を χ_ℓ について書き直すと

$$D_\ell \chi_\ell = 0, \quad D_\ell \equiv \frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{2(\ell+1)}{\rho} \frac{d}{d\rho} + 1 \quad (\text{J.7})$$

が得られる。 ρ の任意の関数 f に対し、微分演算子 D_ℓ は

$$D_\ell \frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} f = \frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} D_{\ell-1} f \quad (\text{J.8})$$

なる性質をもつことに注意。式 (J.8) をよく見ると、いったん $D_{\ell-1} \chi_{\ell-1} = 0$ の解 $\chi_{\ell-1}$ が得られれば、 $D_\ell \chi_\ell = 0$ の解 χ_ℓ が

$$\chi_\ell = \frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \chi_{\ell-1} \quad (\text{J.9})$$

の形で自動的に求めることができる構造になっていることがわかる。

量子力学での対応物はないが、 $\ell = -1$ のとき微分方程式はとても単純な形

$$D_{-1} \chi_{-1} = 0, \quad D_{-1} = \frac{d^2}{d\rho^2} + 1 \quad (\text{J.10})$$

をしており、その解は

$$\chi_{-1} = -C_1 \cos \rho - C_2 \sin \rho \quad (\text{J.11})$$

である。ここで C_1 と C_2 は任意定数。これを式 (J.9) を適用すれば、 $\ell = 0$ のときの解 χ_0 が

$$\chi_0 = \frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \chi_{-1} = \frac{C_1}{\rho} \sin \rho - \frac{C_2}{\rho} \cos \rho \quad (\text{J.12})$$

であることがわかる。さらに任意の整数 $\ell \geq 0$ のときの解 χ_ℓ が

$$\chi_\ell = \frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \chi_{-1} = C_1 \left(\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \right)^\ell \left(\frac{\sin \rho}{\rho} \right) - C_2 \left(\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \right)^\ell \left(\frac{\cos \rho}{\rho} \right) \quad (\text{J.13})$$

であることを示すことも容易である。

以上の結果をまとめると、微分方程式 (J.1) の解が

$$R_\ell = C_j^{(\ell)} j_\ell(\rho) + C_n^{(\ell)} n_\ell(\rho) \quad (\text{J.14})$$

で与えられることがわかる。ここで、 $C_j^{(\ell)}$ 、 $C_n^{(\ell)}$ は定数であり、関数 $j_\ell(\rho)$ と $n_\ell(\rho)$ は

$$j_\ell(\rho) = (-\rho)^\ell \left(\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \right)^\ell \left(\frac{\sin \rho}{\rho} \right), \quad (\text{J.15})$$

$$n_\ell(\rho) = -(-\rho)^\ell \left(\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \right)^\ell \left(\frac{\cos \rho}{\rho} \right) \quad (\text{J.16})$$

で定義されている。 $j_\ell(\rho)$ は $\rho = 0$ で正則であるが、 $n_\ell(\rho)$ は $\rho = 0$ で正則でないことに注意。球面状に外向きに進行する球面波を表す解と内向きに進行する波を表す解は j_ℓ と n_ℓ の重ね合わせで記述され、それぞれ

$$h_\ell^{(1)} = j_\ell(\rho) + i n_\ell(\rho), \quad (\text{J.17})$$

$$h_\ell^{(2)} = j_\ell(\rho) - i n_\ell(\rho), \quad (\text{J.18})$$

である。

関数 $j_\ell, n_\ell, h_\ell^{(1)}, h_\ell^{(2)}$ を総称して球ベッセル関数と呼ぶ⁴¹。関数 j_ℓ を（狭い意味の）球ベッセル関数、 n_ℓ を球ノイマン関数、 $h_\ell^{(1)}, h_\ell^{(2)}$ を球ハンケル関数と呼ぶ。

以下に、 $\ell = 0, 1, 2, 3, 4$ の場合について、球ベッセル関数 $j_\ell(\rho)$ と球ノイマン関数 $n_\ell(\rho)$ の具体形を示す。

$$\begin{aligned}
 j_0(\rho) &= \frac{1}{\rho} \sin \rho, \\
 n_0(\rho) &= -\frac{1}{\rho} \cos \rho, \\
 j_1(\rho) &= \frac{1}{\rho^2} \sin \rho - \frac{1}{\rho} \cos \rho, \\
 n_1(\rho) &= -\frac{1}{\rho^2} \cos \rho - \frac{1}{\rho} \sin \rho, \\
 j_2(\rho) &= \left(\frac{3}{\rho^3} - \frac{1}{\rho} \right) \sin \rho - \frac{3}{\rho^2} \cos \rho, \\
 n_2(\rho) &= -\left(\frac{3}{\rho^3} - \frac{1}{\rho} \right) \cos \rho - \frac{3}{\rho^2} \sin \rho, \\
 j_3(\rho) &= \left(\frac{15}{\rho^4} - \frac{6}{\rho^2} \right) \sin \rho - \left(\frac{15}{\rho^3} - \frac{1}{\rho} \right) \cos \rho, \\
 n_3(\rho) &= -\left(\frac{15}{\rho^4} - \frac{6}{\rho^2} \right) \cos \rho - \left(\frac{15}{\rho^3} - \frac{1}{\rho} \right) \sin \rho, \\
 j_4(\rho) &= \left(\frac{105}{\rho^5} - \frac{45}{\rho^3} + \frac{1}{\rho} \right) \sin \rho - \left(\frac{105}{\rho^4} - \frac{10}{\rho^2} \right) \cos \rho, \\
 n_4(\rho) &= -\left(\frac{105}{\rho^5} - \frac{45}{\rho^3} + \frac{1}{\rho} \right) \cos \rho - \left(\frac{105}{\rho^4} - \frac{10}{\rho^2} \right) \sin \rho.
 \end{aligned}$$

⁴¹このように、球ベッセル関数は3次元量子力学の自由粒子の波動関数を球座標表示するときにあられる関数である。同様に、3次元量子力学の自由粒子の波動関数の円筒座標表示にはベッセル関数（円筒関数）があられる。

球ハンケル関数 $h^{(1)}, h^{(2)}$ の具体形は、 ρ の代わりに $\rho = i\tilde{\rho}$ で定義される $\tilde{\rho}$ で表すと見やすくなる。

$$\begin{aligned} h_0^{(1)}(i\tilde{\rho}) &= -\frac{1}{\tilde{\rho}}e^{-\tilde{\rho}}, \\ h_0^{(2)}(i\tilde{\rho}) &= \frac{1}{\tilde{\rho}}e^{+\tilde{\rho}}, \\ h_1^{(1)}(i\tilde{\rho}) &= i\left(\frac{1}{\tilde{\rho}} + \frac{1}{\tilde{\rho}^2}\right)e^{-\tilde{\rho}}, \\ h_1^{(2)}(i\tilde{\rho}) &= i\left(\frac{1}{\tilde{\rho}} - \frac{1}{\tilde{\rho}^2}\right)e^{+\tilde{\rho}}, \\ h_2^{(1)}(i\tilde{\rho}) &= \left(\frac{1}{\tilde{\rho}} + \frac{3}{\tilde{\rho}^2} + \frac{3}{\tilde{\rho}^3}\right)e^{-\tilde{\rho}}, \\ h_2^{(2)}(i\tilde{\rho}) &= -\left(\frac{1}{\tilde{\rho}} - \frac{3}{\tilde{\rho}^2} + \frac{3}{\tilde{\rho}^3}\right)e^{+\tilde{\rho}}, \\ h_3^{(1)}(i\tilde{\rho}) &= -i\left(\frac{1}{\tilde{\rho}} + \frac{6}{\tilde{\rho}^2} + \frac{15}{\tilde{\rho}^3} + \frac{15}{\tilde{\rho}^4}\right)e^{-\tilde{\rho}}, \\ h_3^{(2)}(i\tilde{\rho}) &= -i\left(\frac{1}{\tilde{\rho}} - \frac{6}{\tilde{\rho}^2} + \frac{15}{\tilde{\rho}^3} - \frac{15}{\tilde{\rho}^4}\right)e^{+\tilde{\rho}}, \\ h_4^{(1)}(i\tilde{\rho}) &= -\left(\frac{1}{\tilde{\rho}} + \frac{10}{\tilde{\rho}^2} + \frac{45}{\tilde{\rho}^3} + \frac{105}{\tilde{\rho}^4} + \frac{105}{\tilde{\rho}^5}\right)e^{-\tilde{\rho}}, \\ h_4^{(2)}(i\tilde{\rho}) &= \left(\frac{1}{\tilde{\rho}} - \frac{10}{\tilde{\rho}^2} + \frac{45}{\tilde{\rho}^3} - \frac{105}{\tilde{\rho}^4} + \frac{105}{\tilde{\rho}^5}\right)e^{+\tilde{\rho}}. \end{aligned}$$

最後に、球ベッセル関数の $\rho \ll 1$ と $\rho \gg \ell$ での性質を（証明抜きで）まとめておく。証明は比較的簡単なので、各自で確かめておくとよい。

- $\rho \ll 1$ での球ベッセル関数のふるまい

$$j_\ell(\rho) \simeq +\frac{\rho^\ell}{(2\ell+1)!!}, \quad (\text{J.19})$$

$$n_\ell(\rho) \simeq -\frac{(2\ell-1)!!}{\rho^{\ell+1}}. \quad (\text{J.20})$$

ここで $n!!$ は自然数 n の二重階乗を意味し、 n が奇数であれば 1 から n までのすべての奇数の積を、 n が偶数であれば 1 から n までのすべての偶数の積を表す。

$$1!! = 1, \quad 2!! = 2, \quad 3!! = 3 \cdot 1, \quad 4!! = 4 \cdot 2, \quad 5!! = 5 \cdot 3 \cdot 1, \quad \dots$$

- $\rho \gg \ell$ での球ベッセル関数のふるまい

$$j_\ell(\rho) \simeq \frac{1}{\rho} \sin\left(\rho - \frac{\ell\pi}{2}\right), \quad (\text{J.21})$$

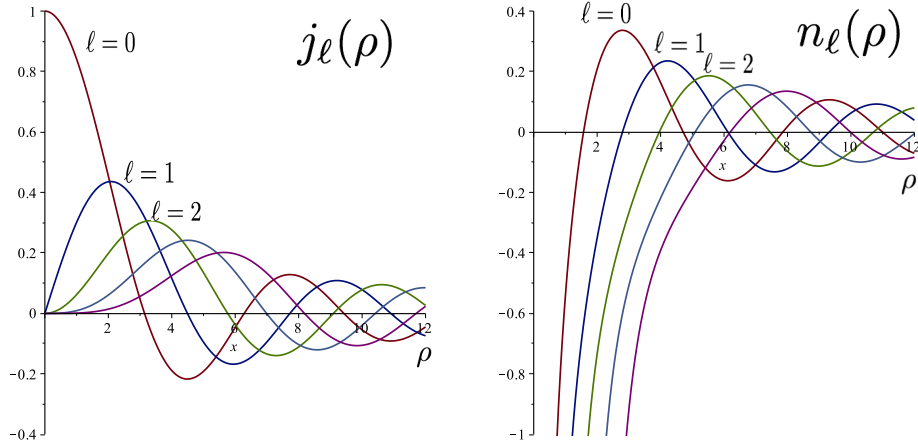
$$n_\ell(\rho) \simeq -\frac{1}{\rho} \cos\left(\rho - \frac{\ell\pi}{2}\right). \quad (\text{J.22})$$

つまり、原点で正則な解 $R_\ell = j_\ell(kr)$ は、 $r \gg \ell/k$ では

$$R_\ell(r) \simeq -\frac{1}{2ikr} \left[e^{-i(kr-\ell\pi/2)} - e^{i(kr-\ell\pi/2)} \right]$$

と近似できる。この式の初項は原点に向かって落ち込んで行く球面波を、第2項は原点から外向きに出て行く球面波を表している。原点で正則な解 $R_\ell = j_\ell(kr)$ において、この両者の大きさは等しい。

$\ell = 0, 1, 2, 3, 4$ について、球ベッセル関数 $j_\ell(\rho)$ と球ノイマン関数 $n_\ell(\rho)$ の振る舞いを下図に示す。



$\ell = 0, 1, 2, 3, 4$ の場合の球ベッセル関数 $j_\ell(\rho)$

$\ell = 0, 1, 2, 3, 4$ の場合の球ノイマン関数 $n_\ell(\rho)$

J.2 3次元球対称井戸型ポテンシャル

この付録では、質量 μ の粒子の3次元球対称井戸型ポテンシャル

$$V(\vec{x}) = V(r) = \begin{cases} -V_0, & \text{for } r < a, \\ 0, & \text{for } r > a, \end{cases} \quad r \equiv \sqrt{x^2 + y^2 + z^2} \quad (\text{J.23})$$

への束縛状態を考える⁴²。ここで、 $a > 0$ は長さの次元をもつ定数 (井戸の半径) であり、 $-V_0 < 0$ は井戸の深さを表す。

時間に依存しないシュレディンガー方程式

$$Eu = \left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta + V(\vec{x}) \right] u \quad (\text{J.24})$$

を球座標を用いて書き直し、波動関数 u を

$$u = R_\ell(r) Y_{\ell m}(\theta, \varphi) \quad (\text{J.25})$$

と変数分離することで、動径方程式

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2} (E - V(r)) \right] R_\ell(r) = 0 \quad (\text{J.26})$$

を得る。 $k > 0$ と $\kappa > 0$ を

$$E + V_0 = \frac{\hbar^2}{2\mu} k^2, \quad E = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \kappa^2 \quad (\text{J.27})$$

で定義する。動径方程式 (J.26) を解くことによって、動径関数 $R_\ell(r)$ が³、球ベッセル関数を用いて

$$R_\ell(r) = \begin{cases} A_\ell j_\ell(kr) + B_\ell n_\ell(kr), & \text{for } r < a, \\ C_\ell h_\ell^{(1)}(i\kappa r) + D_\ell h_\ell^{(2)}(i\kappa r), & \text{for } r > a, \end{cases} \quad (\text{J.28})$$

⁴² 3次元球対称井戸型ポテンシャルが引き起こす粒子散乱の散乱断面積計算は、量子力学3で学ぶ。

と表せることがわかる。ここで、 $j_\ell, n_\ell, h_\ell^{(1)}, h_\ell^{(2)}$ の定義は付録 J.1 を参照のこと $A_\ell, B_\ell, C_\ell, D_\ell$ は定数である。 $r=0$ で波動関数が正則であることと、 $\lim_{r \rightarrow \infty} R_\ell(r) = 0$ より、 $B_\ell = D_\ell = 0$ でなければならない。さらに、 $r=a$ における接続条件から、

$$A_\ell j_\ell(ka) = C_\ell h_\ell^{(1)}(i\kappa a), \quad A_\ell k j'_\ell(ka) = C_\ell i\kappa h_\ell^{(1)'}(i\kappa a) \quad (\text{J.29})$$

が得られる。ここで、 $j'_\ell, h_\ell^{(1)'}$ はそれぞれ球ベッセル関数の導関数である。式 (J.29) が非自明な解をもつためには、

$$\det \begin{pmatrix} j_\ell(ka) & -h_\ell^{(1)}(\kappa a) \\ k j'_\ell(ka) & -i\kappa h_\ell^{(1)' }(\kappa a) \end{pmatrix} = 0 \quad (\text{J.30})$$

を満たさねばならない。

以下では、角運動量がゼロ ($\ell=0$) のときについて条件 (J.30) を少し詳しく調べてみよう。このとき、条件 (J.30) から

$$\kappa = -\frac{k}{\tan ka} \quad (\text{J.31})$$

が得られる。これは 1次元量子力学での井戸型ポテンシャルの奇パリティ解の存在条件式 (4.60) とまったく同一の条件である。つまり、3次元量子力学の球対称井戸型ポテンシャルに対し、 $\ell=0$ の束縛状態が存在するためには、ポテンシャルの深さ V_0 は

$$V_0 a^2 > \frac{\pi^2 \hbar^2}{8\mu} \quad (\text{J.32})$$

の条件を満たさねばならない。同様に、 $\ell=1$ の束縛状態が存在するためには、ポテンシャルの深さは

$$V_0 a^2 > \frac{\pi^2 \hbar^2}{2\mu} \quad (\text{J.33})$$

を満たさねばならないことがわかる。

1次元量子力学では、どんなにポテンシャルが浅くても、引力でありさえすれば束縛状態が存在したことを思い起こそう。この性質は、実は、1次元の場合に特有のものであって2次元以上の量子力学では成立しない性質である。2次元以上の場合には、ポテンシャルが非常に浅い場合は粒子を束縛することが不可能になる。