物理学科課題演習 A5 発表資料

京都大学理学部
横田悠斗

2021 年 12 月 27 日

1　トーマス = フェルミの原子模型

$Z \gg 1$ であるような原子の基底状態に対するポテンシャルをトーマスとフェルミの半古典的方法を適用させることによって導く。原子が基底状態にあるとき、電子を見出す確率は球対称性をもっているとする。すなわち、中心から等距離である球殻上において確率は同じであると仮定する。この仮定では角度成分電子の分布密度は依存しないので、中心を原点として、体積要素 $(r, r+dr)$ の中に電子を見出す確率密度を $\rho(r)$ と置くことができる。この時、全空間に電子は Z 個あるので規格化条件より

$$4\pi \int_0^\infty \rho(r) r^2 dr = Z \tag{1.1}$$

が成り立つ。電子一つの電荷が $-e$ であり、確率密度が $\rho(r)$ なので Z 個の電子の全体は原子核の周りに負の電気を持つ雲を作り、その密度は $-e\rho(r)$ となる。原子の中に分配された電荷の全体は電荷密度による静電ポテンシャル $\boldsymbol{\Phi}(r)$ を形成する。ここでポテンシャルは全て中心方向より以降 $\Phi(r)$ と表す。
静電ポテンシャル $\Phi(r)$ を形成する要因として、具体的にどのような電荷分布となっているかというと、原点にある Ze の点電荷からの寄与と、原点中心に球対象に分布する電荷密度 $-e\rho(r)$ からの寄与の重ね合わせにおける静電ポテンシャルである。ここで、時間に依らないマックスウェル方程式により

$$\mathrm{div}\boldsymbol{E}(\boldsymbol{x}) = \nabla \cdot \boldsymbol{E}(\boldsymbol{x}) = -4\pi e\rho(\boldsymbol{x}) \tag{1.2}$$

が成り立ち、また定義より

$$\boldsymbol{E}(\boldsymbol{x}) = -\mathrm{grad}\Phi(\boldsymbol{x}) \tag{1.3}$$

であるので、(3) を (2) に代入することでポアソン方程式

$$\Delta\Phi(\boldsymbol{x}) = \mathrm{div}\ \mathrm{grad}\Phi(\boldsymbol{x}) = 4\pi e\rho(\boldsymbol{x}) \tag{1.4}$$

が成り立つ。$\rho(\boldsymbol{x})$ は球対象で分布しており、$\rho(r)$ と書けることから、ラプラシアンをデカルト座標から三次元極座標に変換すると

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} = \frac{1}{r}\left(\frac{d^2}{dr^2}r\right) + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2} \tag{1.5}$$

となるので、第二項、第三項 θ, ϕ における微分が消えて、

$$\frac{1}{r}\frac{d^2}{dr^2}r\Phi(r) = 4\pi e\rho(r) \tag{1.6}$$

と単純な r の微分方程式の形で表すことができる。ただし、原点にある Ze の大きさを持つ核は電子の存在する空間に比べて非常に局在した空間にあるため点電荷として考えることで、原点付近では点電荷によるポテンシャル $\dfrac{Ze}{r}$ が非常に大きくなり、電子におけるポテンシャルの寄与はいたるところで有限の値 $\Phi_e(r)$ となるため、境界条件として

$$\lim_{r\to+0} r\Phi(r) = \lim_{r\to+0} r\left(\frac{Ze}{r} + \Phi_e(r)\right) = Ze \tag{1.7}$$

を持つものとする。

$Z \gg 1$ であるような大きな原子においては、1 つの電子による場は他のすべての電子によって形成される場に比べて非常に小さい為、ポテンシャル $\Phi(r)$ 中を各電子が独立に運動すると考える独立粒子近似を行うことで、各電子を支配するポテンシャルは $-e\Phi(r)$ と書ける。よって量子力学的にこの状態を捉えると、原子の基底状態は質量 m の粒子が場 $-e\Phi(r)$ の中で占める状態のうち最低エネルギー状態に Z 個の電子がいるということである。ここで、$\rho(r)$ は $-e\Phi(r)$ に依存することは自明であるが、具体的にどのような関係であるのか決定するために半古典的な近似を用いる。古典的な極限において、エネルギー帯 $(\epsilon, \epsilon + \delta\epsilon)$ にある定常状態の個数は、これに対応する古典粒子の位相空間の中で同じエネルギー帯が占める体積に比例する。電子がスピンの異なる 2 つの状態を取りうることから、不確定性原理 $(\Delta r \cdot \Delta p \sim h)$ により $\Delta r \cdot \Delta p = h$ の体積に一つの量子状態が対応するという立場のもとで考えるとその比例定数は $\dfrac{2}{h^3}$ である。よって、最初の Z 個の量子状態を電子が占めるとき、原子の中のエネルギー分布は Z 個の電子からなる古典統的な混合系と同じであり、位相空間における密度を $n(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{p})$ とすると、

$$n(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{p}) = \begin{cases} \dfrac{2}{h^3} & \left(\epsilon = \dfrac{p^2}{2m} - e\Phi \le \epsilon_0\right) \\ 0 & (\epsilon > \epsilon_0) \end{cases} \tag{1.8}$$

であり、ここで ϵ_0 は電子の占める状態エネルギーのうち最高のものである。すなわち、Z 個の電子のエネルギーが全体的に最小となるように順に電子を最低エネルギー順位から敷き詰めていったときに、最後に敷き詰められる電子のエネルギーのことである。エネルギーの原点は任意に定めることができる（エネルギーの差にしか依らない）のでここでは $\epsilon_0 = 0$ とする。原子内電子の空間分布 $\rho(r)$ は古典統計と同じアナロジーから

$$\rho(r) = \int n(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{p}) d\boldsymbol{p} = \frac{2}{h^3} \int_{\epsilon \le 0} d\boldsymbol{p} \tag{1.9}$$

と書ける。ここで、$\int_{\epsilon \le 0} d\boldsymbol{p}$ は $|\boldsymbol{p}| \le \sqrt{2me\Phi(r)}$ を満たす部分における空間積分、すなわち運動量空間において半径 $\sqrt{2me\Phi(r)}$ の球の体積を表すため、具体的に積分計算を行い、

$$\int_{\epsilon \le 0} d\boldsymbol{p} = \int_{|\boldsymbol{p}| \le \sqrt{2me\Phi}} d\boldsymbol{p} = \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\pi} \sin\theta d\theta \int_0^{\sqrt{2me\Phi}} p^2 dp = \frac{4}{3}\pi \left(\sqrt{2me\Phi}\right)^3 \tag{1.10}$$

と表せることを用い

$$\rho(r) = \begin{cases} \dfrac{8\pi}{3h^3}(2me\Phi)^{\frac{3}{2}} & (\Phi \ge 0) \\ 0 & (\Phi < 0) \end{cases} \tag{1.11}$$

となる。よってこの式を (1.6) に代入することにより、Φ に関する二階の微分方程式が得られる。また、条件 (1.1) と (1.7) により、完全に Φ の関数は定められる。

関係式 (1.7),(1.11),(1.1),(1.10) をトーマス = フェルミ模型の基本関係式という。

トーマス＝フェルミ模型の基本関係式

$$\lim_{r \to +0} r\Phi(r) = Ze \tag{1.7}$$

$$\rho(r) = \begin{cases} \frac{8\pi}{3h^3}(2me\Phi)^{\frac{3}{2}} & (\Phi \geq 0) \\ 0 & (\Phi < 0) \end{cases} \tag{1.11}$$

$$4\pi \int_0^\infty \rho(r) r^2 dr = Z \tag{1.1}$$

$$n(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{p}) = \begin{cases} \frac{2}{h^3} & (\epsilon = \frac{p^2}{2m} - e\Phi \leq \epsilon_0) \\ 0 & (\epsilon > \epsilon_0) \end{cases} \tag{1.10}$$

これらの関係式から Φ と ρ を導くためには以下の変数変換を施すと都合がよい。

$$r = Z^{-\frac{1}{3}} bx \tag{1.12}$$

$$\Phi = \frac{Ze}{r}\chi \tag{1.13}$$

ただしここでは b は

$$b = \frac{1}{2}\left(\frac{3\pi}{4}\right)^{\frac{2}{3}} \frac{\hbar^2}{me^2} \simeq \frac{1}{2}\left(\frac{3 \times 3.14}{4}\right)^{\frac{2}{3}} \frac{(1.06 \times 10^{-34})^2}{9.11 \times 10{-}31 \times (1.6 \times 10^{-19})^2} = 0.5 \times 10^{-3}\mathrm{cm} \tag{1.14}$$

である。これにより、x, χ という無次元量での関係式を立てることができる。(1.11) より、ρ を次元の無い量 χ 及び x で表して、

$$\rho(\chi) = \begin{cases} \frac{Z^2}{4\pi b^3}\left(\frac{\chi}{x}\right)^{\frac{3}{2}} & (\chi \geq 0) \\ 0 & (\chi < 0) \end{cases} \tag{1.15}$$

が得られる。よって基本方程式 (1.6) はこれらの式を用いて

$$\frac{1}{r}\frac{d^2}{dr^2} r\Phi(r) = \frac{1}{Z^{-\frac{1}{3}}bx}\frac{1}{(Z^{-\frac{1}{3}}b)^2}\frac{d^2}{dx^2}\left(r\frac{Ze}{r}\chi\right) = \frac{Z^2 e}{b^3 x}\frac{d^2\chi}{dx^2} \tag{1.16}$$

$$4\pi e\rho(\chi) = \begin{cases} \frac{Z^2 e}{b^3}\left(\frac{\chi}{x}\right)^{\frac{3}{2}} & (\chi \geq 0) \\ 0 & (\chi < 0) \end{cases} \tag{1.17}$$

より、

$$\frac{d^2\chi}{dx^2}(x) = \begin{cases} x^{-\frac{1}{2}}\chi^{\frac{3}{2}} & (\chi \geq 0) \\ 0 & (\chi < 0) \end{cases} \tag{1.18}$$

が結果的に得られる。ここで条件 (1.7) より、$\chi(0) = 1$ である。ここで、明らかに $\chi(x)$ は区間 $(0, \infty)$ において微分可能であるので、もし $\chi(x)$ が零点を持つと仮定すると、零点のうち最小のものを x_0 とするとき、$x = x_0$ で $\chi(x)$ は正から負に転じることになる。その際 $x = x_0$ での傾きは負または 0 であり、傾きが負の場合、$\chi(x)$ が負において (1.18) から $\chi(x)$ が直線となることがわかり、以降 $\chi(x)$ が負から正に転じることはないことがわかる。よって零点は高々 1 つしか持たない。よってこの零点を x_0 とすると、χ は区間 $(0, x_0)$ において正であり、区間 (x_0, ∞) において負である。このことから (1.12),(1.13) を用いて (1.1) を表すと、

$$1 = \int_0^{x_0} \sqrt{x}\chi^{\frac{3}{2}} dx = \int_0^{x_0} x\frac{d^2\chi}{dx^2} dx = \left[x\frac{d\chi}{dx} - \chi\right]_0^{x_0} = x_0\frac{d\chi}{dx}(x_0) + 1 \tag{1.19}$$

すなわち

$$\left.\frac{d\chi}{dx}\right|_{x=x_0} = 0 \tag{1.20}$$

が導かれる。このことより χ の導関数は χ が 0 になる点で同様に 0 となる。もし、$0 < x_0 < \infty$ であるとすると $\chi(x_0) = 0, \chi'(x_0) = 0$ という初期条件から $\chi(x) = 0$ となってしまい、$\chi(0) = 1$ に矛盾する。よって、$\chi(\infty) = 0$ である必要がある。結局このことから $\chi(x)$ は

$$\frac{d^2\chi}{dx^2}(x) = x^{-\frac{1}{2}}\chi^{\frac{3}{2}} \tag{1.21}$$

のうち、条件 $\chi(0) = 1, \chi(\infty) = 0$ を満たすものである。

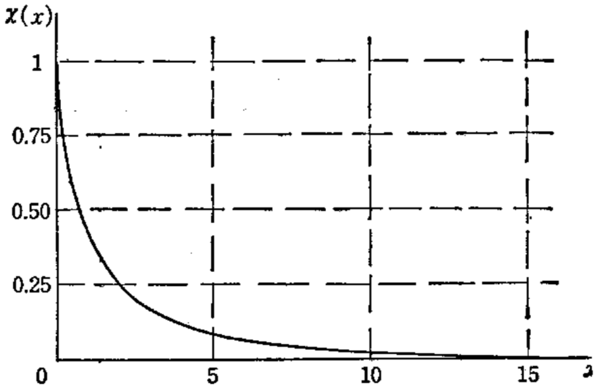

図1　$\chi(0) = 1, \chi(\infty) = 0$ を満たす $\dfrac{d^2\chi}{dx^2}(x) = x^{-\frac{1}{2}}\chi^{\frac{3}{2}}$ の解

ここで、数値積分により $\chi(x)$ が分かれば、(1.12)(1.13)(1.14)(1.15) を用いてどのような Z に対しても関数 $\rho(r)$ と $\Phi(r)$ を以下のように求めることができる。

$$\rho(x) = \frac{Z^2}{4\pi b^3}\left(\frac{\chi(x)}{x}\right)^{\frac{3}{2}} = \frac{Z^2}{4\pi b^3}\left(\frac{b\chi(r)}{Z^{\frac{1}{3}}r}\right)^{\frac{3}{2}} = \frac{1}{4\pi}\left(\frac{Z\chi(r)}{br}\right)^{\frac{3}{2}} \tag{1.22}$$

$$\Phi(x) = \frac{Ze}{r}\chi(r) \tag{1.23}$$

このような古典近似が正しいためには、Z 個の電子それぞれの状態のうち、大部分が量子数の大きな状態の中に入っている事、すなわち $Z \gg 1$ が必要である。与えられた原子に対して、トーマス = フェルミ模型が定める電子模型 $\rho(r)$ 及び静電ポテンシャル $\Phi(r)$ は特有の長さ $\dfrac{\hbar^2}{me^2}$ と電子雲の全電荷 $-Ze$ を一定に保ちながら、$\hbar$ と各電子の電荷 $-e$ を限りなく小さくし、核の周りをまわる電子の個数 Z を限りなく大きくした極限において得られる。

トーマス = フェルミ模型から原子の半径に対する一つの評価を導くことができる。この半径の定義にはいくらかの任意性はある。実際電子密度は無限遠点でしか 0 にならないから電子は区切られた空間領域にのみ占める対象ではないためである。ここで、原点を中心とした球を考え、この原子に属する Z 個の電子のうち、$(1-\alpha)Z$ 個が含まれるときの半径 $R(\alpha)$ を原子の半径と呼ぶ。この定義により

$$(1-\alpha)Z = 4\pi\int_0^{R(\alpha)} \rho(r)r^2 dr \tag{1.24}$$

が成り立つ。ここで先ほどのアナロジーにより

$$R(\alpha) = Z^{-\frac{1}{3}} b X(\alpha) \tag{1.25}$$

と置くと、

$$1-\alpha = \int_0^{X(\alpha)} \sqrt{X}\chi^{\frac{3}{2}} dX = \int_0^{X(\alpha)} X\frac{d^2\chi}{dX^2}dX = \left[X\frac{d\chi}{dX}-\chi\right]_0^{X(\alpha)} = X(\alpha)\frac{d\chi}{dX}(X(\alpha)) - \chi(X(\alpha)) + 1 \tag{1.26}$$

すなわち、

$$\chi(X) - X\frac{d\chi}{dX}(X) = \alpha \tag{1.27}$$

が得られる。この方程式は解析的には解けず、数値的に解かなければならない。

ここで、全ての原子に対して同じ α の値を採用するならば、$X(\alpha)$ はすべての原子に対して同じであり、原子の半径は (1.25) により $Z^{-\frac{1}{3}}$ 比例する。

また、$\alpha = \dfrac{1}{Z}$ と置くならば、対応する半径

$$\tilde{R} = R\left(\frac{1}{Z}\right) = Z^{-\frac{1}{3}} b X\left(\frac{1}{Z}\right) \tag{1.28}$$

によって、1 個を除いた残り $Z-1$ 個の電子を全部含む球の半径が表される。

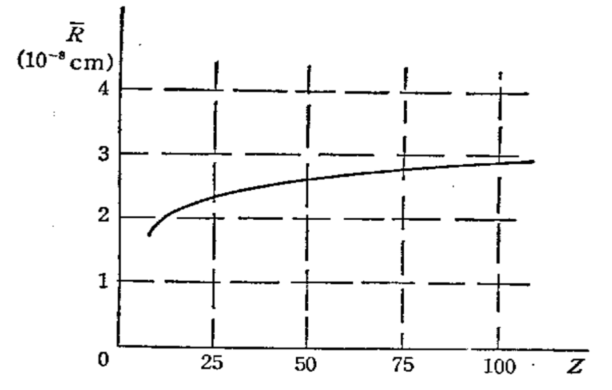

図2 トーマス = フェルミ原子の半径 $\tilde{R}$ を Z の関数として表したもの

これから $\tilde{R}$ が実際上 Z にほぼ依存しないことがわかる。

ここで、

$$\lim_{r\to+0} r\frac{d\chi}{dr} = 1 \tag{1.29}$$

を (1.3) を用いて導く。

球対象であることを用いると Gauss の発散定理により、半径 r の球面における電場 $\boldsymbol{E}(r)$ の面積は半径 r の球内にある電荷で表されるので

$$E(r) = \frac{Ze}{r^2} - \frac{4\pi e}{r^2}\int_0^r \rho(r')r'^2 dr' \tag{1.30}$$

が成り立ち、この式の第二項を (1.6) を用いて変換すると

$$
\begin{aligned}
E(r) = \frac{Ze}{r^2} - \frac{1}{r^2}\int_0^r r' \frac{d^2}{dr'^2} r'\Phi(r')dr' &= \frac{Ze}{r^2} - \frac{1}{r^2}\left[r'\frac{d}{dr'}(r'\Phi(r')) - r'\Phi(r') \right]_0^r \\
&= \frac{Ze}{r^2} - \frac{1}{r^2}\left(r\frac{d}{dr}(r\Phi) - r\Phi - \lim_{r\to+0} r\frac{d\Phi}{dr} \right) \\
&= \frac{Ze}{r^2} - \frac{Ze}{r^2}\left(r\frac{d\chi}{dr} - \chi - \lim_{r\to+0} r\frac{d\chi}{dr} \right)
\end{aligned}
\tag{1.31}
$$

一方 (1.3) より

$$
E(r) = -\mathrm{grad}\Phi(r) = -\mathrm{grad}\frac{Ze}{r}\chi = \frac{Ze}{r^2}\left(\chi - r\frac{d\chi}{dr} \right) \tag{1.32}
$$

この二つの式を比べることで

$$
\lim_{r\to+0} r\frac{d\chi}{dr} = 1 \tag{1.29}
$$

を得る。

2　三次元極座標におけるラプラシアン

ここで補足として、三次元極座標におけるラプラシアンを求めておく。まずは直交座標を三次元極座標で表した

$$
\begin{cases}
x = r\sin\theta\cos\phi & (-\infty < x < \infty) \\
y = r\sin\theta\sin\phi & (-\infty < y < \infty) \\
z = r\cos\theta & (-\infty < z < \infty)
\end{cases}
\tag{2.1}
$$

から、三次元極座標を直交座標で表すと

$$
\begin{cases}
r = \sqrt{x^2+y^2+z^2} & (0 \le r < \infty) \\
\theta = \tan^{-1}\dfrac{\sqrt{x^2+y^2}}{z} & (0 \le \theta \le \pi) \\
\phi = \tan^{-1}\dfrac{y}{x} & (0 \le \phi \le 2\pi)
\end{cases}
\tag{2.2}
$$

となる。これらにより x, y, z による微分を r, θ, ϕ による微分に置き換えていく。まず連鎖律により

$$
\frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial r}{\partial x}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial \theta}{\partial x}\frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\partial \phi}{\partial x}\frac{\partial}{\partial \phi} \tag{2.3}
$$

$$
\frac{\partial}{\partial y} = \frac{\partial r}{\partial y}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial \theta}{\partial y}\frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\partial \phi}{\partial y}\frac{\partial}{\partial \phi} \tag{2.4}
$$

$$
\frac{\partial}{\partial z} = \frac{\partial r}{\partial z}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial \theta}{\partial z}\frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\partial \phi}{\partial z}\frac{\partial}{\partial \phi} \tag{2.5}
$$

が成り立ち、

$$
\frac{\partial r}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x}\sqrt{x^2+y^2+z^2} = \frac{x}{\sqrt{x^2+y^2+z^2}} = \frac{r\sin\theta\cos\phi}{r} = \sin\theta\cos\phi \tag{2.6}
$$

$$
\frac{\partial \theta}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x}\left(\tan^{-1}\frac{\sqrt{x^2+y^2}}{z} \right) = \frac{xz}{(x^2+y^2+z^2)\sqrt{x^2+y^2}} = \frac{\cos\theta\cos\phi}{r} \tag{2.7}
$$

$$
\frac{\partial \phi}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x}\left(\tan^{-1}\frac{y}{x} \right) = -\frac{y}{x^2+y^2} = -\frac{r\sin\theta\sin\phi}{r^2\sin^2\theta} = -\frac{\sin\phi}{r\sin\theta} \tag{2.8}
$$

$$\frac{\partial r}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial y}\sqrt{x^2+y^2+z^2} = \frac{y}{\sqrt{x^2+y^2+z^2}} = \frac{r\sin\theta\sin\phi}{r} = \sin\theta\sin\phi \tag{2.9}$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial y}\left(\tan^{-1}\frac{\sqrt{x^2+y^2}}{z}\right) = \frac{yz}{(x^2+y^2+z^2)\sqrt{x^2+y^2}} = \frac{\cos\theta\sin\phi}{r} \tag{2.10}$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial y}\left(\tan^{-1}\frac{y}{x}\right) = \frac{x}{x^2+y^2} = \frac{r\sin\theta\cos\phi}{r^2\sin^2\theta} = \frac{\cos\phi}{r\sin\theta} \tag{2.11}$$

$$\frac{\partial r}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial z}\sqrt{x^2+y^2+z^2} = \frac{z}{\sqrt{x^2+y^2+z^2}} = \frac{r\cos\theta}{r} = \cos\theta \tag{2.12}$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial z}\left(\tan^{-1}\frac{\sqrt{x^2+y^2}}{z}\right) = \frac{xz}{(x^2+y^2+z^2)^{\frac{3}{2}}} = \frac{\cos\theta\cos\phi}{r} \tag{2.13}$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial z}\left(\tan^{-1}\frac{y}{x}\right) = 0 \tag{2.14}$$

を用いて直交座標を三次元極座標に変更すると、

$$\frac{\partial}{\partial x} = \sin\theta\cos\phi\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos\theta\cos\phi}{r}\frac{\partial}{\partial\theta} - \frac{\sin\phi}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi} \tag{2.15}$$

$$\frac{\partial}{\partial y} = \sin\theta\sin\phi\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos\theta\sin\phi}{r}\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{\cos\phi}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi} \tag{2.16}$$

$$\frac{\partial}{\partial z} = \cos\theta\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos\theta\cos\phi}{r}\frac{\partial}{\partial\theta} \tag{2.17}$$

この変換式を用いることで、

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} = \frac{1}{r}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2}r\right) + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2} \tag{2.18}$$

を得る。

別のアプローチとして、$\rho = r\sin\theta$ とおくと、$x = \rho\cos\phi$、$y = \rho\sin\phi$ であるから、三次元極座標から直交座標への変換は

$$(r,\theta,\phi) \to (z,\rho,\phi) \to (x,y,z)$$

と分解でき、これは、二次元極座標から直交座標への変換を二回行ったものに等しい。二次元極座標におけるラプラシアンより、

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} = \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho} + \frac{1}{\rho^2}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2} \tag{2.19}$$

$$\frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} \tag{2.20}$$

(2.19),(2.20) 式を加えて

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho} + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2} \tag{2.21}$$

と書けるが、ここで、二次元極座標と直交座標との変換則により、

$$\frac{\partial}{\partial\rho} = \sin\theta\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos\theta}{r}\frac{\partial}{\partial\theta} \tag{2.22}$$

が成り立つので

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} = \frac{1}{r}\left(\frac{d^2}{dr^2} r\right) + \frac{1}{r^2 \sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{r^2 \sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2} \tag{2.23}$$

が得られる。

3　参考文献

[1] アルベール・メシア量子力学、東京図書、1972 年。