

C. 極座標

■座標系 空間の中の点を表す方法は様々である．同じ点であっても方法によって異なる数値で表される．それぞれの方法を座標系という．最も単純なのは直交座標（デカルト座標）である．しかし，問題によっては空間に特別な点が存在し，そこからの距離が重要な場合や，空間に特別な方向が存在する場合がある．このような場合にはそれに応じた座標を使う方が便利なものも多い．一般に，前者には極座標，後者には円柱座標が適している．

■極座標 （水素）原子の構造のように，原子核という中心があつて，そのまわりの電子の様子に興味があるときには，極座標も便利に用いられる．極座標では，原点からの距離 r と二つの偏角， θ と ϕ ，で位置を表す．直交座標と極座標の関係は図 C-1 の通りである．

$$\begin{aligned}x &= r \sin \theta \cos \phi \\y &= r \sin \theta \sin \phi \\z &= r \cos \theta\end{aligned}\tag{C.1}$$

であることは容易に確認できるであろう．ここで r の変域は 0 から ∞ ， θ は 0 から π ， ϕ は 0 から 2π である．

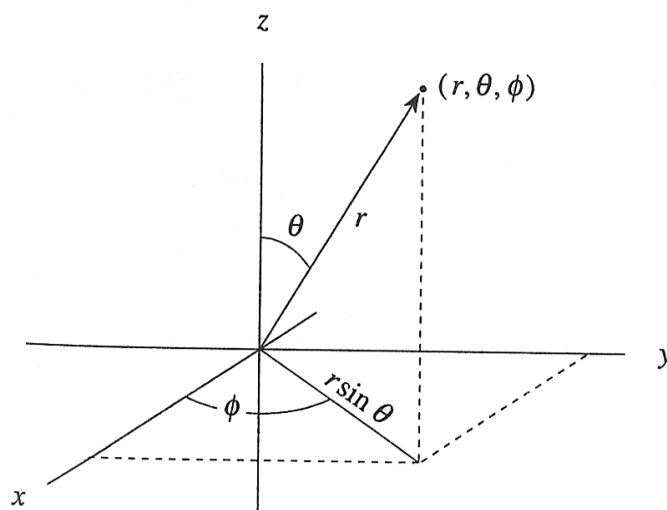


図 C-1 直交座標と極座標.

■空間積分 空間積分を行う際に必要となる体積素片は

$$dV = dx dy dz = r^2 \sin \theta dr d\theta d\phi \quad (\text{C.2})$$

である．全空間について積分する際の積分範囲は各変数の変域である．球対称な関数 $f(r)$ を積分する際には角度での積分を先にしてしまうことができ，

$$\begin{aligned} \int_V f(r) dV &= \int_0^\infty dr \int_0^\pi d\theta \int_0^{2\pi} d\phi f(r) r^2 \sin \theta \\ &= \int_0^\infty 4\pi r^2 f(r) dr \end{aligned} \quad (\text{C.3})$$

とできる．

■ラプラシアン 極座標で表示したラプラシアン（ラプラス演算子）は

$$\begin{aligned} \nabla^2 &= \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \\ &= \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \end{aligned} \quad (\text{C.4})$$

となる．微分操作の対象となる関数が r だけの関数（球対称な関数）なら，初項だけになる．