

システム基礎数学 II

1 はじめに

○ 今後の予定は

1. 偏微分
2. 変分法
3. デルタ関数
4. 複素積分
5. 直交関数系
6. 直交多項式

○ 成績のつけ方

出席点 (50%:小テスト) と期末テスト (50% :演習を含む) で行う。
毎回の講義の最後に小テストを行い、それを出席の代わりとする。

2 微分と偏微分

2.1 偏微分の定義

$$\frac{\partial f}{\partial x} \equiv \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{f(x + \Delta x, y, z) - f(x, y, z)}{\Delta x} \quad (1)$$

偏微分の表現の仕方はこれ以外にも、

$$f_x \equiv \frac{\partial f}{\partial x} \equiv \left(\frac{\partial f}{\partial x} \right)_{y,z} \equiv \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{f(x + \Delta x, y, z) - f(x, y, z)}{\Delta x} \quad (2)$$

などある。最後の表現は、 y と z を止めて、 x だけ微分することを明示的に表している。特に、熱力学で用いられる。 ∂ は ラウンド・ディー (round d) と読むが、この授業では、縮めてデル (デルタ delta より) と読む。

例: 気体の圧縮率と熱膨張率の定義

$$\kappa_T = -\frac{1}{V} \frac{\partial V(p, T)}{\partial p} \quad (3)$$

$$\kappa_p = -\frac{1}{V} \frac{\partial V(p, T)}{\partial T} \quad (4)$$

2.2 高階偏導関数の定義

$$f_{xx} = \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \equiv \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial f}{\partial x} \right) \quad (5)$$

$$f_{xy} = \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y} \equiv \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial f}{\partial x} \right) \quad (6)$$

$$f_{yx} = \frac{\partial^2 f}{\partial y \partial x} \equiv \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial f}{\partial y} \right) \quad (7)$$

$$f_{yy} = \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} \equiv \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial f}{\partial y} \right) \quad (8)$$

通常は、 f_{xy} と f_{yx} が連続であれば、 $f_{xy} = f_{yx}$ が成り立つので、違いを気にする必要はない。

2.3 全微分の定義

$f(x, y)$ において、 x と y を少し変化させると、増加分は

$$\Delta f = f(x + \Delta x, y + \Delta y) - f(x, y) \quad (9)$$

となる。 Δx と Δy が小さいとすると

$$\Delta f = \frac{\partial f}{\partial x} \Delta x + \frac{\partial f}{\partial y} \Delta y \quad (10)$$

となり、無限小の極限をとると

$$df = \frac{\partial f}{\partial x} dx + \frac{\partial f}{\partial y} dy \quad (11)$$

と書ける。この形を全微分という。

例: 熱力学の基本的関係式

$$dU = TdS - pdV \quad (12)$$

注意: 物理系の論文や教科書では、 dx と斜体 (イタリック) ではなく、 dx と d を立体 (ロマン) で書く。これは、変数を斜体で書くので、 d は変数ではなく、微分の記号だということを区別するためである。ここでは、誤解が無いとおもうので、(面倒なので) 区別はつけない。

2.4 ラグランジュの未定乗数

最大値や最小値を求める問題を極値 (local minimum や local maximum) を求める問題に置き換えると、 $f(x, y, z)$ の極値は、

$$\frac{\partial f(x, y, z)}{\partial x} = 0, \quad \frac{\partial f(x, y, z)}{\partial y} = 0, \quad \frac{\partial f(x, y, z)}{\partial z} = 0 \quad (13)$$

を満たす、 (x, y, z) を求めることになる。ところが、 (x, y, z) の間に何らかの関係式、つまり、

$$g(x, y, z) = c(\text{定数}) \quad (14)$$

のような関係がある場合には、 (x, y, z) は独立に変化しないので、

$$\frac{\partial g}{\partial x} dx + \frac{\partial g}{\partial y} dy + \frac{\partial g}{\partial z} dz = 0 \quad (15)$$

という条件の基に、

$$df = \frac{\partial f}{\partial x} dx + \frac{\partial f}{\partial y} dy + \frac{\partial f}{\partial z} dz = 0 \quad (16)$$

を解くことになる。結局、 dz を消去して、

$$\frac{\partial f}{\partial z} - \lambda \frac{\partial g}{\partial z} = 0 \quad (17)$$

と置けば、

$$df = \left(\frac{\partial f}{\partial x} - \lambda \frac{\partial g}{\partial x} \right) dx + \left(\frac{\partial f}{\partial y} - \lambda \frac{\partial g}{\partial y} \right) dy = 0 \quad (18)$$

と書け、 dx と dy は任意にとれるから、

$$\frac{\partial f}{\partial x} - \lambda \frac{\partial g}{\partial x} = 0, \quad \frac{\partial f}{\partial y} - \lambda \frac{\partial g}{\partial y} = 0 \quad (19)$$

を解けばよい。

まとめると、 $g = \text{定数}$ のような条件付きの場合に、 f の極値を求める問題は、 $f - \lambda g$ に対する極値問題に還元できる。決めねばならない独立変数は、 (x, y, z) と λ の 4 つになるが、 x, y, z おおののに関する偏微分がゼロという 3 条件に、 $g = \text{定数}$ という式がひとつで、合計四つ式があるので解ける。新しく導入した λ をラグランジュの未定乗数という。条件が 2 つあれば、 λ, μ などとラグランジュの未定乗数を 2 個導入する。

例: 楕円に内接する長方形の面積の最大値を求めよ。

2.5 ヤコビアン

三つの関数 $f(x, y, z)$, $g(x, y, z)$, $h(x, y, z)$ に対して、各々について、 x, y, z の偏微分をとると、9 つの成分が求まる。この行列式をとったものをヤコ

ビアン (Jacobian) という。

$$\frac{\partial(f, g, h)}{\partial(x, y, z)} \equiv \begin{vmatrix} \frac{\partial f}{\partial x} & \frac{\partial f}{\partial y} & \frac{\partial f}{\partial z} \\ \frac{\partial g}{\partial x} & \frac{\partial g}{\partial y} & \frac{\partial g}{\partial z} \\ \frac{\partial h}{\partial x} & \frac{\partial h}{\partial y} & \frac{\partial h}{\partial z} \end{vmatrix} \quad (20)$$

ヤコビアンは、積分変数の変換によく用いられる。

$$\int \int \int df dg dh = \int \int \int \frac{\partial(f, g, h)}{\partial(x, y, z)} dx dy dz \quad (21)$$

定義から、次のような性質が出て来る。

$$\frac{\partial(f, g, h)}{\partial(u, v, w)} \frac{\partial(u, v, w)}{\partial(x, y, z)} = \frac{\partial(f, g, h)}{\partial(x, y, z)} \quad (22)$$

$$\frac{\partial(x, y, z)}{\partial(x, y, z)} = \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix} = 1 \quad (23)$$

$$\frac{\partial(f, g, h)}{\partial(x, y, z)} = \frac{1}{\frac{\partial(x, y, z)}{\partial(f, g, h)}} \quad (24)$$

$$\frac{\partial(f, g, h)}{\partial(x, y, z)} = -\frac{\partial(g, f, h)}{\partial(x, y, z)} = -\frac{\partial(f, g, h)}{\partial(y, x, z)} \quad (25)$$

$$\left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_{y, z} = \frac{\partial f(x, y, z)}{\partial x} = \frac{\partial(f, y, z)}{\partial(x, y, z)} \quad (26)$$

2.6 同次関数の偏微分

$$f(ax, ay, az) = a^p f(x, y, z) \quad (27)$$

を満たす場合、 $f(x, y, z)$ を p 次の同次関数という。同次関数については

$$x \frac{\partial f}{\partial x} + y \frac{\partial f}{\partial y} + z \frac{\partial f}{\partial z} = pf \quad (28)$$

が成り立つ。

例：

熱力学においては、系の質量などを a 倍にしたときに、 a 倍になる量と変わらない量がある。

$$U(aS, aV) = aU(S, V) \quad (29)$$

なので

$$U = S \frac{\partial U}{\partial S} + V \frac{\partial U}{\partial V} \quad (30)$$

2.7 ライプニッツの微分公式

関数の積の微分に関しては、

$$\frac{d^n}{dx^n}(fg) = \sum_{r=0}^n \binom{n}{r} \frac{d^{n-r} f}{dx^{n-r}} \frac{d^r g}{dx^r} \quad (31)$$

例：

xe^x の n 階導関数を求めよ。

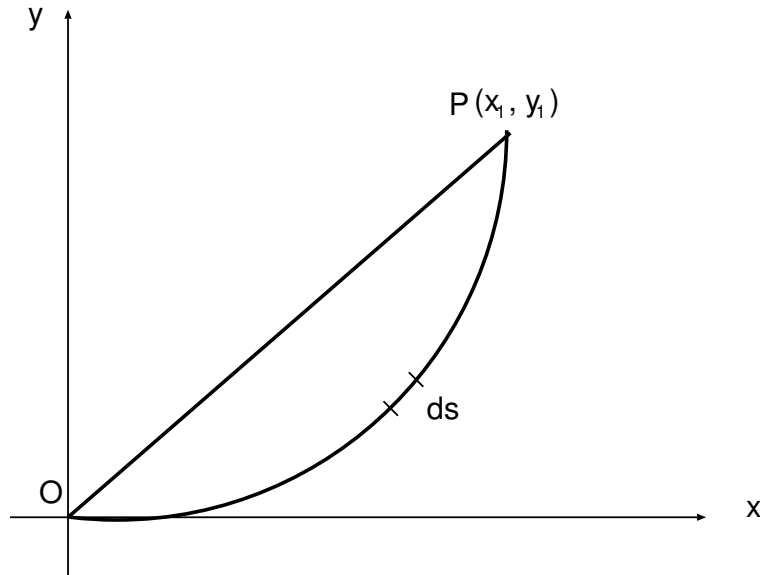


図 1: 原点 O からある点 $P(x_1, y_1)$ までの最短距離を求めよ。

3 変分法

3.1 変分法とは？

例えば、図 1 のように、原点 O からある点 P までの最短距離を求める問題を考える。答えは、 O と P を結ぶ直線であるが、数学的な定式化を使うと、「積分

$$I = \int_O^P ds \quad (32)$$

が最小となる経路を求めよ。」という問題になる。経路は図のようにいろいろ考えられる。この経路が

$$y = y(x) \quad (33)$$

という関数で与えられるとする。この場合、

$$ds = \sqrt{dx^2 + dy^2} = dx \sqrt{1 + \left(\frac{dy}{dx}\right)^2} = dx \sqrt{1 + (y')^2} \quad (34)$$

となるので、

$$I[y] = \int_O^P \sqrt{1 + (y')^2} dx \quad (35)$$

となる。

$y(x)$ の形をいろいろ変形して、 I が最小値をとる関数形を求めればよい。

$y \rightarrow y + \delta y$ とすると、

$$\delta I[y] \equiv I[y + \delta y] - I[y] = \int_O^P \sqrt{1 + (y' + \delta y')^2} dx - \int_O^P \sqrt{1 + (y')^2} dx \quad (36)$$

となる。最小値は、極値となるので、

$$\begin{aligned} \delta I[y] &= \int_O^P \frac{y'}{\sqrt{1 + (y')^2}} \delta y' dx \\ &= \frac{y'}{\sqrt{1 + (y')^2}} \delta y \Big|_O^P - \int_O^P \left(\frac{d}{dx} \frac{y'}{\sqrt{1 + (y')^2}} \right) \delta y dx \\ &= 0 \end{aligned} \quad (37)$$

が条件となり、点 O と P の端点では、任意の $\delta y = 0$ でなければならないので、第一項はゼロになる。したがって、任意の δy について 0 になるには、

$$\frac{d}{dx} \frac{y'}{\sqrt{1 + (y')^2}} = 0 \quad (38)$$

が必要条件となる。これは、

$$\frac{y'}{\sqrt{1 + (y')^2}} = \text{定数} \quad (39)$$

となるので、結局は、

$$y' = \text{定数} \quad (40)$$

であり、

$$y = cx + d \quad (41)$$

という点 O と P を通る直線となる。 c と d は定数。 $y \rightarrow y + \delta y$ のようにおいて、積分 I の極小値を求める方法を、変分法という。

3.2 オイラー方程式

$f(x, y, y')$ が $x, y(x), y'(x) = dy/dx$ の関数で与えられるとき、積分汎関数

$$I[y] = \int_a^b f(x, y, y') dx \quad (42)$$

が極値をとるような $y(x)$ を求める。ここで、 $I[y]$ のように関数 y の関数を汎関数とよぶ。ただし、

$$y_1 = y(a), \quad y_2 = y(b) \quad (43)$$

という境界条件が与えられているとする。 $y \rightarrow y + \delta y$ と置いて、積分 I の変分がゼロとすると、

$$\delta I[y] = \int_a^b \left[\frac{\partial f(x, y, y')}{\partial y} \delta y + \frac{\partial f(x, y, y')}{\partial y'} \delta y' \right] dx$$

$$= \frac{\partial f(x, y, y')}{\partial y'} \delta y \Big|_a^b + \int_a^b \left[\frac{\partial f(x, y, y')}{\partial y} - \frac{d}{dx} \frac{\partial f(x, y, y')}{\partial y'} \right] \delta y dx \quad (44)$$

つまり、

$$\frac{\partial f(x, y, y')}{\partial y} - \frac{d}{dx} \frac{\partial f(x, y, y')}{\partial y'} = 0 \quad (45)$$

となる。これをオイラー (Euler) 方程式とよぶ。

例：2点間を結ぶ最短距離を与える経路を求める問題は、上記のオイラー方程式で、

$$f(y') = \sqrt{1 + (y')^2} \quad (46)$$

で与えられる。

例：フェルマーの原理

図1のように、原点Oを出て点Pに到る光線の経路は、場所(x, y)の屈折率をn(x, y)とすると、積分

$$I = \int_O^P n(x, y) ds \quad (47)$$

を最小にする。最短距離の問題と同様にして、

$$I = \int_O^P n(x, y) \sqrt{1 + (y')^2} dx \quad (48)$$

と変形される。この場合は、オイラー方程式で、

$$f(x, y, y') = n(x, y) \sqrt{1 + (y')^2} \quad (49)$$

となる。

3.3 従属変数が複数個の場合

関数が複数個の場合は、 y_1, y_2, \dots として、

$$I[y_1, y_2, \dots] = \int_O^P f(x, y_1, y_1', y_2, y_2', \dots) dx \quad (50)$$

が極値をとるような y_1, y_2, \dots を求めることになる。関数が1個の場合と同様に変分を $y_1 \rightarrow y_1 + \delta y_1, y_2 \rightarrow y_2 + \delta y_2, \dots$ とると、

$$\frac{\partial f}{\partial y_1} - \frac{d}{dx} \frac{\partial f}{\partial y_1'} = 0 \quad (51)$$

$$\frac{\partial f}{\partial y_2} - \frac{d}{dx} \frac{\partial f}{\partial y_2'} = 0 \quad (52)$$

$$\dots \quad (53)$$

と従属変数の個数分の方程式が得られる。

3.4 ハミルトンの原理とラグランジュの運動方程式

ハミルトン (Hamilton) の原理は、「座標 x_1, x_2 で記述される力学系のラグランジアンを $L(t, x_1, \dot{x}_1, x_2, \dot{x}_2)$ とするとき、系の運動方程式は、

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} L(t, x_1, \dot{x}_1, x_2, \dot{x}_2) dt = 0 \quad (54)$$

から得られる。」というものである。ラグランジアン L は、運動エネルギー T とポテンシャルエネルギー V の差、

$$L = T - V \quad (55)$$

である。この変分問題から得られるオイラー方程式は、

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i} - \frac{\partial L}{\partial x_i} = 0, \quad (i = 1, 2) \quad (56)$$

となり、系の運動方程式である。解析力学では、これをラグランジュ (Lagrange) の運動方程式とよぶ。

例: 質量 M_1 と M_2 のお重りをばね乗数 k_1, k_2 のばねにつるした場合の運動方程式。

ラグランジアンは、

$$L = \frac{1}{2} M_1 \dot{x}_1^2 + \frac{1}{2} M_2 \dot{x}_2^2 - \frac{1}{2} k_1 x_1^2 - \frac{1}{2} k_2 (x_1 - x_2)^2 \quad (57)$$

で与えられるので、運動方程式は、

$$M_1 \ddot{x}_1 + k_1 x_1 + k_2 (x_1 - x_2) = 0 \quad (58)$$

$$M_2 \ddot{x}_2 + k_2 (x_2 - x_1) = 0 \quad (59)$$

となる。

3.5 積分系の付加条件付きの場合

関数 $y(x)$ に対する制約として、境界条件のみを取り上げたが、それに加えて、積分系の付加条件

$$J = \int_a^b g(x, y, y') dx = c \text{ (定数)} \quad (60)$$

が付く場合を考える。ラグランジュの未定乗数法を用いると、

$$\delta(I - \lambda J) = 0 \quad (61)$$

から、

$$F(x, y, y') \equiv f(x, y, y') - \lambda g(x, y, y') \quad (62)$$

に対するオイラー方程式

$$\frac{d}{dx} \frac{\partial F}{\partial y'} - \frac{\partial F}{\partial y} = 0 \quad (63)$$

が導かれる。

例:

境界条件 $y(0) = y(1) = 0$ と付加条件

$$\int_0^1 y dx = 1 \quad (64)$$

のもとで、

$$I = \int_0^1 (y')^2 dx \quad (65)$$

を最小にする関数 $y(x)$ を求めよ。

3.6 微分方程式の固有値問題と変分問題

付加条件つきの変分問題として、

$$I[u] = \int_a^b \left[p(x) \left(\frac{du}{dx} \right)^2 - q(x)u^2 \right] dx \quad (66)$$

付加条件として、

$$\int_a^b u^2 w(x) dx = 1 \quad (67)$$

とする。端点 a と b での境界条件としては、

$$u(a) = u(b) = 0 \quad (68)$$

あるいは、

$$p(a)u'(a) = p(b)u'(b) = 0 \quad (69)$$

とする。この変分問題のオイラー方程式は、ラグランジュの未定乗数法を用いて、

$$F \equiv p(x)u'^2 - q(x)u^2 - \lambda w(x)u^2 \quad (70)$$

に対するオイラー方程式としてえられる。結局、

$$\left(p(x) \frac{du}{dx} \right) + q(x)u + \lambda w(x)u = 0 \quad (71)$$

が導かれる。このような場合、勝手な λ をとると、常に $u(x) = 0$ の解しか得られない。特別な値の λ を選ぶときに、常にゼロではない u が得られる。このような特別な値の λ を固有値とよぶ。また、この形の方程式は、振動の固有値問題として物理にはよくあらわれる。シュツルム-リュウビル (Strum-Liouville)

型の方程式あるいは、シュツルム-リュービル型の固有値問題ともよばれる。量子力学のシュレーディンガー (Schrödinger) 方程式の固有値問題もその例である。

$I[u]$ の極値と固有値の間には

$$I[u] = \lambda \quad (72)$$

の関係がある。これは、(66) を部分積分して、

$$I[u] = p(x) \frac{du}{dx} u \Big|_a^b - \int_a^b \left[\frac{d}{dx} \left(p(x) \frac{du}{dx} \right) + q(x)u \right] u dx \quad (73)$$

となる。第一項は境界条件により消えて、(71) 式を代入して、

$$I[u] = \int_a^b \lambda w(x) u^2 dx = \lambda \quad (74)$$

となる。この場合は、変分問題と固有値問題は同等ということになる。

4 デルタ関数

4.1 デルタ関数とは？

デルタ関数 (delta-function) $\delta(x)$ は $x \neq 0$ では常にゼロで、その積分が 1 となる関数である。すなわち、

$$\left. \begin{aligned} \delta(x) &= 0 \text{ for } x \neq 0 \\ \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} \delta(x) dx &= 1 \end{aligned} \right\} \quad (75)$$

で定義される。ここで ε は十分小さい任意の正の実数である。デルタ関数はその定義から、

$$\delta(-x) = \delta(x) \quad (76)$$

という性質を持つので、偶関数である。また、この性質を使うと、

$$\int_0^{\varepsilon} \delta(x) dx = \frac{1}{2} \quad (77)$$

である。

4.2 デルタ関数の特徴

デルタ関数の最も重要な特徴は、ある連続な関数 $f(x)$ の a を含む区間の積分が

$$\int f(x) \delta(x - a) dx = f(a) \quad (78)$$

となることである。また、 a が正の実数として、

$$\delta(ax) = \frac{1}{a} \delta(x) \quad (79)$$

となることも、 $y = ax$ と置換して、

$$1 = \int \delta(y) dy = a \int \delta(ax) dx \quad (80)$$

より分かる。 a が負であれば、偶関数の性質を使って、

$$1 = \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} \delta(y) dy = a \int_{\varepsilon}^{-\varepsilon} \delta(ax) dx = -a \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} \delta(ax) dx \quad (81)$$

より、

$$\delta(ax) = -\frac{1}{a} \delta(x) \quad (82)$$

となる。まとめて、

$$\delta(ax) = \frac{1}{|a|} \delta(x) \quad (83)$$

となる。

上記の関係式を一般の関数 $f(x)$ に拡張すると、

$$\delta(f(x)) = \sum_i \frac{1}{|f'(a_i)|} \delta(x - a_i) \quad (84)$$

となる。ここで、 a_i は $f(a_i) = 0$ を満たす実数である。このことは、 a_i を含む微小な区間で積分で $y = f(x)$ と置換して、

$$1 = \int_{-\varepsilon'}^{\varepsilon'} \delta(y) dy = \int_{-\varepsilon+a_i}^{\varepsilon+a_i} \delta(f(x)) f'(x) dx \quad (85)$$

より、分かる。

デルタ関数の導関数 $\delta'(x)$ は、部分積分を用いて

$$\int_{-\varepsilon+a}^{\varepsilon+a} f(x) \delta'(x-a) dx = [f(x) \delta(x-a)]_{-\varepsilon+a}^{\varepsilon+a} - \int_{-\varepsilon+a}^{\varepsilon+a} f'(x) \delta(x-a) dx = -f'(a) \quad (86)$$

を満たす。

a で $f(x)$ が不連続であれば、式 (78) の代わりに

$$\int f(x) \delta(x-a) dx = \frac{f(a+0) + f(a-0)}{2} \quad (87)$$

が成り立つ。

例:

$$\delta(x^2 - a^2) = \frac{\delta(x+a) + \delta(x-a)}{2|a|} \quad (88)$$

ここで、 $x^2 - a^2 = 0$ の解は、 $x = a$ と $x = -a$ の二つなので、式 (84) より、上記の式が出る。

4.3 デルタ関数の他の表現

いろいろな関数の極限として、デルタ関数を表現することができる。たとえば、

$$\delta(x) = \lim_{a \rightarrow 0} \frac{1}{\pi} \frac{a}{x^2 + a^2} \quad (89)$$

である。これは、 $x = a \tan \theta$ と置換して、

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{a}{x^2 + a^2} dx = 2 \int_0^{\pi/2} \cos^2 \theta \frac{1}{\cos^2 \theta} d\theta = \pi \quad (90)$$

となるので、デルタ関数としての条件を満たす。

これ以外にも、

$$\delta(x) = \lim_{a \rightarrow 0} \frac{1}{a\sqrt{\pi}} \exp\left(-\frac{x^2}{a^2}\right) \quad (91)$$

や

$$\delta(x) = \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{\sin Lx}{\pi x} \quad (92)$$

がある。ここで、

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} dx = \sqrt{\pi} \quad (93)$$

および

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin Lx}{\pi x} dx = 1 \quad (94)$$

を用いた。

さて、次のような積分で定義される関数 $f(x)$ を考える。

$$f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx} dk \quad (95)$$

このままでは収束しない。そこで、まず積分区間を有限にとると、

$$f(x) = \lim_{L \rightarrow \infty} \int_{-L}^L e^{ikx} dk = \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{e^{iLx} - e^{-iLx}}{ix} = \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{2 \sin Lx}{x} \quad (96)$$

となるので、結局、

$$2\pi\delta(x) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx} dk \quad (97)$$

となる。

4.4 3次元デルタ関数

デルタ関数の3次元空間への拡張は、

$$\delta(\mathbf{r}) = \delta(x)\delta(y)\delta(z) \quad (98)$$

となる。さらに、

$$\delta(\mathbf{r}) = \int \int \int e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} d\mathbf{k} \quad (99)$$

や

$$\int \int \int f(\mathbf{k})\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') d\mathbf{r} = f(\mathbf{r}') \quad (100)$$

などが成り立つ。

4.5 フーリエ変換とデルタ関数の関係

ある関数 $f(x)$ が与えられたときに、

$$g(k) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ikx} f(x) dx \quad (101)$$

を、 $f(x)$ のフーリエ (Fourier) 変換という。このようにして定義されたフーリエ変換の逆変換は、

$$f(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx} g(k) dk \quad (102)$$

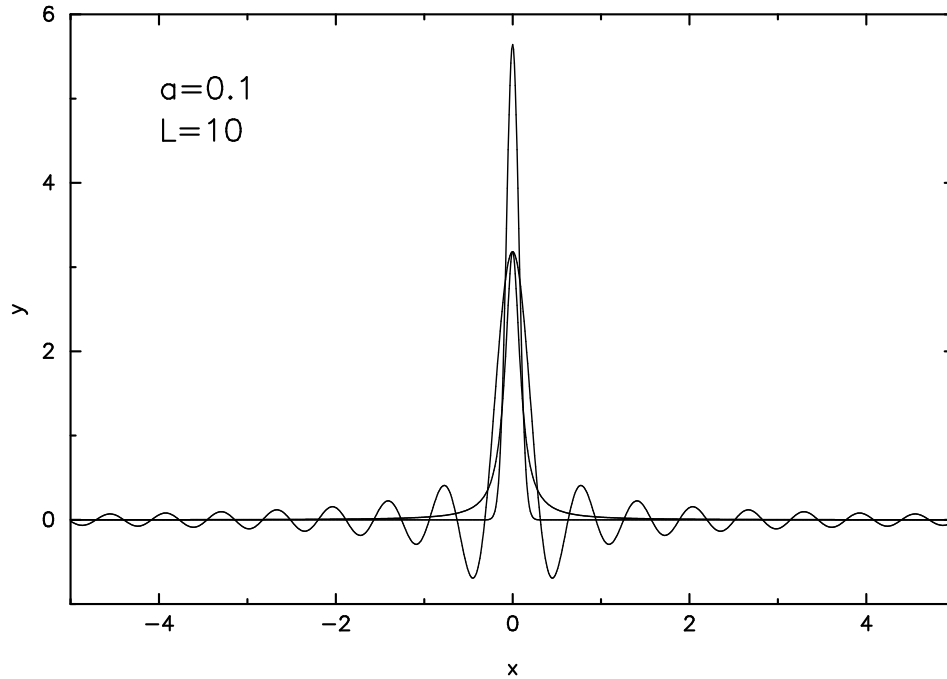


図 2: 3つのデルタ関数の近似表現。式 (89)、式 (91)、式 (92) を表す。ここでは、 $a = 0.1$ 、 $L = 10$ を採用した。

で与えられる。このことは、式 (101) を代入して、

$$\begin{aligned}
 & \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx} g(k) dk = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ikx'} f(x') dx' dk \\
 &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ik(x-x')} f(x') dx' dk = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} 2\pi \delta(x-x') f(x') dx' \\
 &= f(x)
 \end{aligned} \tag{103}$$

より、分かる。

デルタ関数のフーリエ変換は、定義より

$$g(k) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ikx} \delta(x) dx = 1 \tag{104}$$

である。また、逆変換は、式 (97) より

$$f(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx} 1 dk = \delta(x) \tag{105}$$

となる。

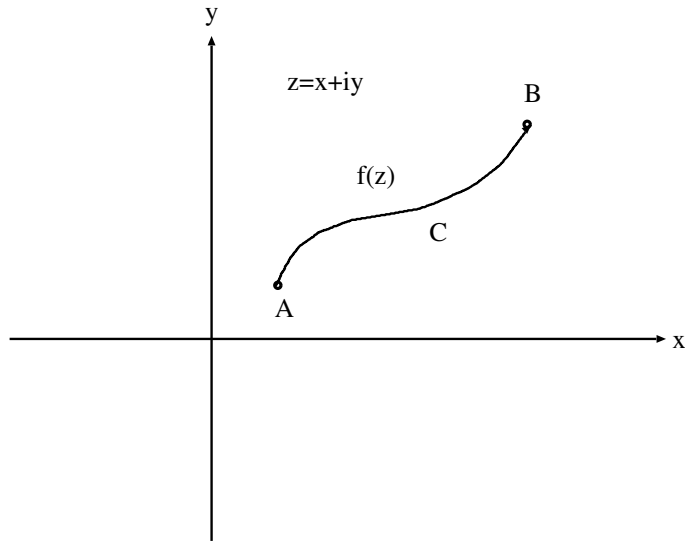


図 3: 積分路 C に沿って点 A から B まで、 $f(z)$ を積分する。

5 複素積分

5.1 複素積分とは？

複素数 $z = x + iy$ の関数 $f(z)$ が連続である場合に、 $x - y$ 平面上のある曲線 C (点 A から B まで) を N 分割し、それぞれの分割素片 n 上の任意の点を γ_n とし、極限

$$S = \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{n=1}^N f(\gamma_n) \Delta z_n \quad (106)$$

をとる。(ここで、 $\Delta z_k = z_{k+1} - z_k$ である。) これを $f(z)$ の点 A から B までの積分と定義し、

$$S = \int_C f(z) dz \quad (107)$$

と書くことにする。

例 1: 図 4 の積分路 A-A'-B に沿って $f(z) = z^2$ の複素積分

$$S = \int_{A-A'-B} f(z) dz = \int_{A-A'-B} z^2 dz \quad (108)$$

を求める。A-A' に沿っては、 x 軸上の積分なので、

$$S_{A-A'} = \int_0^{\sqrt{2}} x^2 dx = \left[\frac{x^3}{3} \right]_0^{\sqrt{2}} = \frac{2\sqrt{2}}{3} \quad (109)$$

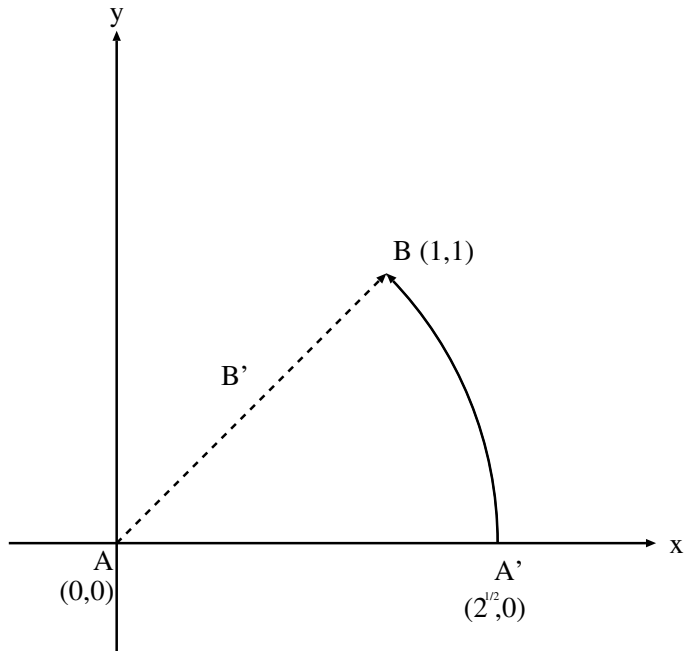


図 4: 積分路に沿って点 A から B まで、 $f(z) = z^2$ を積分する。

となる。次に、 $A'-B'$ に沿っては、半径 $\sqrt{2}$ の円周上を、 $\theta = 0$ から $\theta = \pi/4$ までの積分なので、

$$\begin{aligned} S_{A'-B} &= \int_0^{\pi/4} (\sqrt{2}e^{i\theta})^2 \sqrt{2}ie^{i\theta} d\theta = \frac{2\sqrt{2}}{3} [e^{3i\theta}]_0^{\pi/4} \\ &= \frac{2\sqrt{2}}{3} \left(-\frac{\sqrt{2}}{2} + i\frac{\sqrt{2}}{2} - 1 \right) \end{aligned} \quad (110)$$

結局、

$$S_{A-A'-B} = S_{A-A'} + S_{A'-B} = \frac{2\sqrt{2}}{3} + \frac{2\sqrt{2}}{3} \left(-\frac{\sqrt{2}}{2} + i\frac{\sqrt{2}}{2} - 1 \right) = -\frac{2}{3} + i\frac{2}{3} \quad (111)$$

となる。今度は、別の積分路 $A-B'-B$ を通って、A から B への積分を求めてみよう。この場合は、 $z = (1+i)t$ ($t = 0$ から 1 まで) の様に、パラメータ t を使って積分路上の z を表すことができる。

$$\begin{aligned} S_{A-B'-B} &= \int_0^1 \{(1+i)t\}^2 (1+i) dt \\ &= (1+i)^3 \left[\frac{t^3}{3} \right]_0^1 = \frac{2}{3}(-1+i) \end{aligned} \quad (112)$$

となるので、どちらの積分路をとっても、複素積分の値は同じになる。

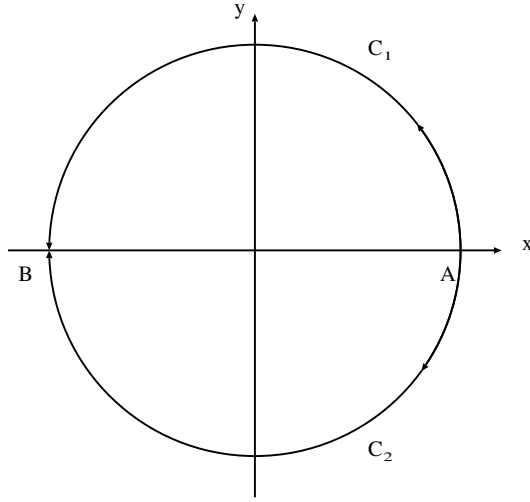


図 5: 積分路 C_1 または C_2 に沿って点 A から B まで、 $f(z) = 1/z$ を積分する。

この例のようにどのような積分路をとっても、同じ値になるような場合には、 $f(z) = z^2$ の不定積分 $\int f(z)dz = z^3/3$ が存在して、

$$\int_A^B f(z)dz = \frac{1}{3}(z_B^3 - z_A^3) \quad (113)$$

となり、始めの点 $A(z_A)$ と終点 $B(z_B)$ の値のみで、積分を表示できる。

逆に、積分路が違えば、積分値が異なる場合もある。このような場合には、不定積分が存在しない。その 1 例として、図 5 のように、関数 $f(z) = 1/z$ を半径 r の円周に沿って、 x 軸の上側を積分路 C_1 に沿って積分する場合と、下側の C_2 に沿って積分する場合を考える。

積分路 C_1 に沿っては、半径 r の円周上を、 $\theta = 0$ から $\theta = \pi$ までの積分なので、

$$S_{C_1} = \int_0^\pi \frac{1}{re^{i\theta}} rie^{i\theta} d\theta = \int_0^\pi id\theta = i\pi \quad (114)$$

となる。また、積分路 C_2 に沿っては、半径 r の円周上を、 $\theta = 2\pi$ から $\theta = \pi$ までの積分なので、

$$S_{C_2} = \int_{2\pi}^\pi \frac{1}{re^{i\theta}} rie^{i\theta} d\theta = \int_{2\pi}^\pi id\theta = -i\pi \quad (115)$$

となり、積分路 C_1 とは 2π の差となる。

複素積分は、線積分と同様の性質を持つので、線積分における関係が成り立つ。(1) 積分路を逆に積分すると、逆符号になる。

$$\int_A^B f(z)dz = - \int_B^A f(z)dz \quad (116)$$

(2) 積分路を分割すると、おのおのの積分の和となる。積分路を A-B を間に中間点 C を入れて分割すると

$$\int_A^B f(z)dz = \int_A^C f(z)dz + \int_C^B f(z)dz \quad (117)$$

となる。

5.2 コーシーの積分定理

コーシー (Cauchy) の定理: $f(z)$ が単連結 (つまり穴がない) の領域で正則 (無限回微分可能) ならば、その領域内の任意の閉曲線 C に対して、

$$\int_C f(z)dz = 0 \quad (118)$$

が成り立つ。もし、分岐線がある場合は、分岐点を避けて、リーマン面上をとればよい。(リーマン面については、必要があるときに解説する。)

この性質を使うと、不定積分をつくることができる。つまり、関数 $f(z)$ がある領域で正則ならば、その領域内の積分

$$F(z) = \int_{z_1}^{z_2} f(z)dz \quad (119)$$

は積分路に依存しない。したがって、1 価関数 $F(z)$ が定義できて、

$$\frac{dF(z)}{dz} = f(z) \quad (120)$$

が成立する。

特異点がある場合でも、その特異点を避けるように積分することで、コーシーの定理を有効につかうことができる。たとえば、図 6 のような積分路をとれば、内部には特異点 \times を含まないので、

$$\int_{C_1} f(z)dz + \int_{L_1} f(z)dz + \int_{C_4} f(z)dz + \int_{L_2} f(z)dz = 0 \quad (121)$$

$$\int_{C_2} f(z)dz + \int_{L_3} f(z)dz + \int_{C_3} f(z)dz + \int_{L_4} f(z)dz = 0 \quad (122)$$

となる。ここで、逆方向の積分は、逆符号となることを使うと、

$$\int_{L_1} f(z)dz + \int_{L_4} f(z)dz = 0 \quad (123)$$

$$\int_{L_2} f(z)dz + \int_{L_3} f(z)dz = 0 \quad (124)$$

となるので、辺々加えて、

$$\int_{C_1} f(z)dz + \int_{C_2} f(z)dz + \int_{C_3} f(z)dz + \int_{C_4} f(z)dz = 0 \quad (125)$$

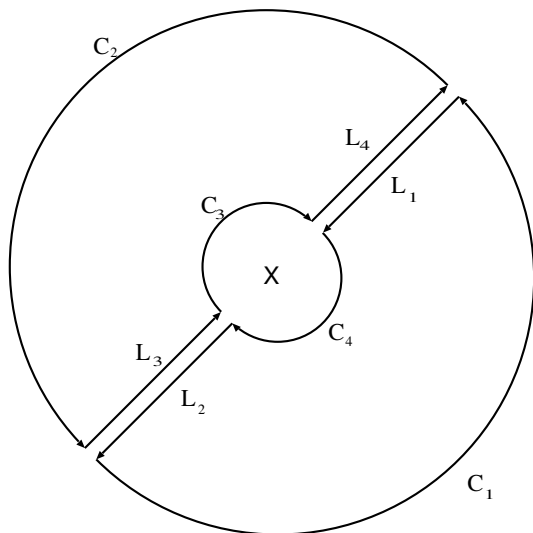


図 6: 特異点の周りの積分。

となり、これより、

$$\int_{C_1} f(z)dz + \int_{C_2} f(z)dz = - \int_{C_3} f(z)dz - \int_{C_4} f(z)dz \quad (126)$$

と変形できる。いま、 C_1 から C_2 へ回る積分路を C 、 C_3 から C_4 へ回る積分路を逆に回る積分路を C' とすると、

$$\int_C f(z)dz = \int_{C'} f(z)dz \quad (127)$$

となり、閉曲線によらず、積分値は同じになる。

5.3 留数定理

ひとつの特異点 $z = a$ を囲んで1周する (反時計回りとする) 積分路を考える。この積分を

$$\int_C f(z)dz = 2\pi i R \quad (128)$$

とする。この R を $z = a$ の留数 (residue) という。いま、 $f(z) = b/(z-a)$ という簡単な特異点を持つ関数を考える。この場合、 $z = a$ の周りに $z = a + r \exp(i\theta)$ となる積分路をとり、 $\theta = 0$ から $\theta = 2\pi$ まで積分するとすると、

$$\int_0^{2\pi} \frac{b}{re^{i\theta}} r i e^{i\theta} d\theta = \int_0^{2\pi} b i d\theta = 2\pi i b \quad (129)$$

となる。すなわち、 $1/(z-a)$ の係数 b が留数となる。

一般の関数の場合に、

$$\lim_{z \rightarrow a} (z-a)f(z) = b \quad (130)$$

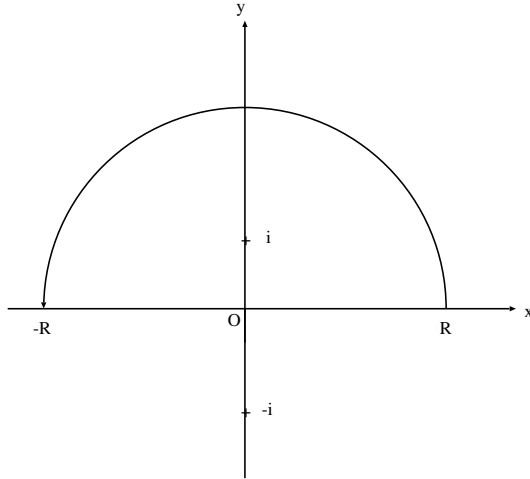


図 7: $-R$ から R までの積分。

が存在すれば、 b が留数となる。また、特異点が複数存在する場合には、

$$\begin{aligned} \int_C f(z) dz &= \int_{C_1} f(z) dz + \int_{C_2} f(z) dz + \int_{C_3} f(z) dz + \cdots \\ &= 2\pi i (R_1 + R_2 + R_3 + \cdots) \end{aligned} \quad (131)$$

と、各々の留数の和となる。

例: $f(z) = 1/z(z-2)$ を原点を中心の半径 1 の円周に沿って積分する。半径 1 の円周の中にある特異点は $z = 0$ のみであるので、

$$\lim_{z \rightarrow 0} z f(z) = -\frac{1}{2} \quad (132)$$

より留数は、 $-1/2$ となるので、留数定理より、

$$\int_{C:|z|=1} f(z) dz = 2\pi i \left(-\frac{1}{2}\right) = -\pi i \quad (133)$$

5.4 定積分への応用

複素積分を使うと、簡単には求まらなかった定積分の値が容易に求めることができる (ことがある)。

例 1:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{x^2+1} dx = \pi \quad (134)$$

積分路を図 7 のようにとると、関数 $f(z) = 1/(z^2+1)$ の特異点は、 $z = i$ となる。

$$\lim_{z \rightarrow i} (z-i) f(z) = -\frac{i}{2} \quad (135)$$

コーシーの定理から、

$$2\pi i\left(-\frac{i}{2}\right) = \pi = \int_{-R}^R \frac{1}{x^2+1} dx + \int_0^\pi \frac{1}{R^2 e^{2i\theta} + 1} Rie^{i\theta} d\theta \quad (136)$$

となり、 $R \rightarrow \infty$ の極限で、右辺第2項はゼロになるので、初期の定積分は示せたことになる。

例 2:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{x^4+1} dx = \frac{\sqrt{2}}{2} \pi \quad (137)$$

積分路を図7のようにとると、積分路内部の関数 $f(z) = 1/(z^4+1)$ の特異点は、 $z^4 = -1$ の解であるから、 $z_1 = \exp(\pi i/4)$ および $z_2 = \exp(3\pi i/4)$ の2つになる。

$$\begin{aligned} \lim_{z \rightarrow \exp(\pi i/4)} (z - e^{\pi i/4})f(z) &= \frac{1}{(z - e^{3\pi i/4})(z - e^{5\pi i/4})(z - e^{7\pi i/4})} \\ &= \frac{e^{-3\pi i/4}}{(1-i)(1+1)(1+i)} = \frac{1}{4} e^{-3\pi i/4} \quad (138) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \lim_{z \rightarrow \exp(3\pi i/4)} (z - e^{3\pi i/4})f(z) &= \frac{1}{(z - e^{\pi i/4})(z - e^{5\pi i/4})(z - e^{7\pi i/4})} \\ &= \frac{e^{-9\pi i/4}}{(1+i)(1-i)(1+1)} = \frac{1}{4} e^{-\pi i/4} \quad (139) \end{aligned}$$

コーシーの定理から、

$$2\pi i \frac{1}{4} (e^{-\pi i/4} + e^{-3\pi i/4}) = \frac{\sqrt{2}}{2} \pi = \int_{-R}^R \frac{1}{x^4+1} dx + \int_0^\pi \frac{1}{R^4 e^{4i\theta} + 1} Rie^{i\theta} d\theta \quad (140)$$

となり、 $R \rightarrow \infty$ の極限で、右辺第2項はゼロになるので、初期の定積分は示せたことになる。

例 3:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin x}{x} dx = \pi \quad (141)$$

積分路を図8のようにとり、 $f(z) = e^{iz}/z$ の積分を考える。コーシーの定理から、

$$\begin{aligned} 0 &= \int_{-R}^{-a} \frac{\cos x + i \sin x}{x} dx + \int_\pi^0 \frac{e^{ia \cos \theta - a \sin \theta}}{ae^{i\theta}} aie^{i\theta} d\theta \\ &+ \int_a^R \frac{\cos x + i \sin x}{x} dx + \int_0^\pi \frac{e^{iR \cos \theta - R \sin \theta}}{Re^{i\theta}} Rie^{i\theta} d\theta \quad (142) \end{aligned}$$

となる。 $a \rightarrow 0$ の極限で、右辺第2項は $-\pi i$ となる。また、 $R \rightarrow \infty$ の極限で、右辺第4項はゼロになるので、結局、

$$0 = \int_{-R}^{-a} \frac{\cos x}{x} dx + \int_a^R \frac{\cos x}{x} dx$$

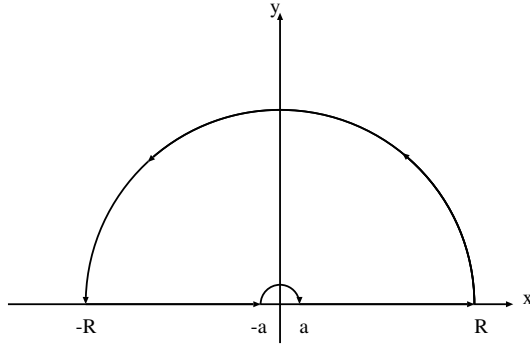


図 8: $-R$ から $-a$ までと、 a から R までの積分。

$$+ i \int_{-R}^{-a} \frac{\sin x}{x} dx + i \int_a^R \frac{\sin x}{x} dx - \pi i \quad (143)$$

さらに、 $\cos x$ の偶関数である性質を使うと、

$$\int_{-R}^{-a} \frac{\cos x}{x} dx = \int_R^a \frac{\cos x}{x} dx = - \int_a^R \frac{\cos x}{x} dx \quad (144)$$

となるので、 $\cos x/x$ の項の積分は打ち消しあってゼロになり、

$$0 = i \int_{-R}^{-a} \frac{\sin x}{x} dx + i \int_a^R \frac{\sin x}{x} dx - \pi i \quad (145)$$

となるので、初期の定積分を示せた。

例 4: フレネル (Fresnel) 積分

$$\int_0^\infty \sin x^2 dx = \int_0^\infty \cos x^2 dx = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{2}} \quad (146)$$

まず、 $\cos x^2 - i \sin x^2 = e^{-ix^2}$ の関係があるので、複素関数 $f(z) = e^{-z^2}$ の積分を図 9 の積分路に沿って考える。45° の積分路は、 $z = r(1+i)/\sqrt{2}$ とあらわせるので、 $z^2 = r^2 i$ となる。また、全空間で正則であるから、コーシーの定理より、

$$\begin{aligned} 0 &= \int_0^R e^{-x^2} dx \\ &+ \int_0^{\pi/4} e^{-R^2(\cos^2 \theta - 2i \sin \theta \cos \theta - \sin^2 \theta)} R i e^{i\theta} d\theta \\ &+ \int_R^0 (\cos r^2 - i \sin r^2) \frac{1+i}{\sqrt{2}} dr \end{aligned} \quad (147)$$

ここで、右辺第 1 項は、定積分 (Gauss 積分)

$$I = \int_0^\infty e^{-x^2} dx = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \quad (148)$$

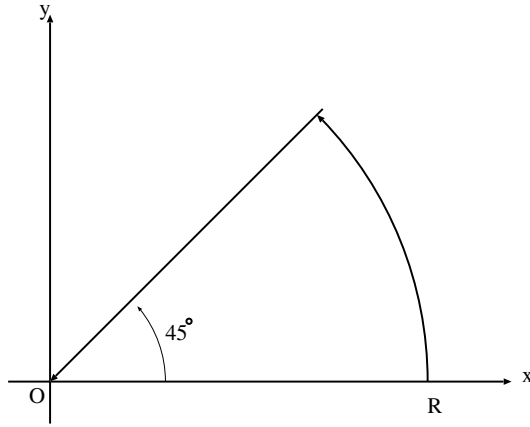


図 9: 0 から R までと、半径 R の 45° まで。さらに、半径 R から原点までの積分。

の結果を使う。右辺第 2 項は、 $\theta < \pi/4$ なら、 $R \rightarrow \infty$ のとき、ゼロになる。右辺第 3 項は、

$$0 = \frac{\sqrt{\pi}}{2} + \int_R^0 (\cos r^2 + \sin r^2) \frac{1}{\sqrt{2}} dr - i \int_R^0 (\cos r^2 - \sin r^2) \frac{1}{\sqrt{2}} dr \quad (149)$$

実数部分と虚数部分に分けると、虚数成分が、ゼロになることから、

$$\int_0^R \cos r^2 dr = \int_0^R \sin r^2 dr \quad (150)$$

が成り立つ。この関係式を使うと、残った実数成分から、

$$0 = \frac{\sqrt{\pi}}{2} + - \int_0^R (\cos r^2 + \sin r^2) \frac{1}{\sqrt{2}} dr \quad (151)$$

となるので、結局、初期の積分が示せた。

最後に定積分 (Gauss 積分)

$$S = 2I = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} dx = \sqrt{\pi} \quad (152)$$

を示す。

$$S = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-y^2} dy \quad (153)$$

とも書けるので、

$$\begin{aligned} S^2 &= \int_0^{\infty} e^{-x^2} dx \int_0^{\infty} e^{-y^2} dy = \int_0^{\infty} \int_0^{\infty} e^{-x^2-y^2} dx dy \\ &= \int_0^{\infty} \int_0^{2\pi} e^{-r^2} r dr d\theta = 2\pi \int_0^{\infty} e^{-r^2} r dr \\ &= \pi [-e^{-x}]_0^{\infty} = \pi \end{aligned} \quad (154)$$

となるので、結局は、

$$I = \frac{S}{2} = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \quad (155)$$

を示せた。

6 直交関数系

6.1 直交関数系としてのフーリエ級数

区間 $[-\pi, \pi]$ ($-\pi \leq x \leq \pi$ を意味する) で実数関数 $f(x)$ が定義されているとき、

$$\begin{aligned} a_n &\equiv \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} f(x) \cos nx dx, \quad (n = 0, 1, 2, \dots) \\ b_n &\equiv \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} f(x) \sin nx dx, \quad (n = 1, 2, 3, \dots) \end{aligned} \quad (156)$$

で定義される a_n 、 b_n をフーリエ (Fourier) 係数とよぶ。また、このようにして求めた a_n 、 b_n を使って、

$$f(x) \sim \frac{1}{2}a_0 + \sum_{n=1}^{\infty} (a_n \cos nx + b_n \sin nx) \quad (157)$$

置いて、この右辺を $f(x)$ のフーリエ級数とよぶ。ここでは、級数の収束性が確かめられていないので、 \sim を使った。また、収束したとしても、 $f(x)$ に一致するかどうかは保証されない。

例: $f(x) = |x|$ のフーリエ級数を求める。 $|x|$ は偶関数だから、 $b_n = 0$ はすぐわかる。また、定義より

$$a_0 = \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} f(x) dx = \frac{2}{\pi} \int_0^{\pi} x dx = \frac{2}{\pi} \left[\frac{x^2}{2} \right]_0^{\pi} = \pi \quad (158)$$

$$\begin{aligned} a_n &= \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} f(x) \cos nx dx = \frac{2}{\pi} \int_0^{\pi} x \cos nx dx \\ &= \frac{2}{\pi} \left(\left[\frac{x \sin nx}{n} \right]_0^{\pi} - \int_0^{\pi} \frac{\sin nx}{n} dx \right) \\ &= \frac{2}{\pi} \left[\frac{x \sin nx}{n} + \frac{\cos nx}{n^2} \right]_0^{\pi} = \frac{2}{\pi} \cdot \frac{(-1)^n - 1}{n^2} \end{aligned} \quad (159)$$

となり、 n が偶数のとき、 $a_n = 0$ となる。よって、

$$|x| \sim \frac{\pi}{2} - \frac{4}{\pi} \left(\cos x + \frac{\cos 3x}{3^2} + \frac{\cos 5x}{5^2} + \dots \right) \quad (160)$$

となる。このフーリエ級数は、次節で述べる定理により、収束し、左辺に一致することが証明される。したがって、特に $x = 0$ と置けば、

$$\frac{\pi^2}{8} = \frac{1}{1^2} + \frac{1}{3^2} + \frac{1}{5^2} + \dots \quad (161)$$

という関係式が得られる。フーリエ級数は、このように右辺のような和を求めるために用いられることがある。

6.2 フーリエ級数の展開定理

フーリエ級数の展開定理: 区間 $[-\pi, \pi]$ ($-\pi \leq x \leq \pi$) において区分的になめらかな関数 $f(x)$ は、フーリエ級数 (157) に展開される。このフーリエ級数は、不連続点を含まない閉区間では、一様に収束する。ただし、不連続点においては、級数は、

$$\frac{f(x-0) + f(x+0)}{2} \quad (162)$$

に収束する。

ここで、区分的になめらかという言葉は、有限個の不連続点を除いて、 $f(x)$ と $f'(x)$ が連続という意味である。これによって、

$$\lim_{n \rightarrow \infty} a_n = 0 \quad (163)$$

および

$$\lim_{n \rightarrow \infty} b_n = 0 \quad (164)$$

が保証される。また、一様収束という意味は、級数がすべての x で一斉に収束し、落ちこぼれる点はないことをいう。

6.3 直交関数系

いま、関数をベクトルとのアナロジーで考える。ある区間 $[a, b]$ で定義された実関数 $f(x)$ と $g(x)$ に対して、ベクトルと同じように内積 (f, g) を

$$(f, g) \equiv \int_a^b f(x)g(x)dx \quad (165)$$

として定義する。自分自身との内積は、

$$(f, f) \equiv \int_a^b f^2(x)dx \geq 0 \quad (166)$$

となり、これが 0 となるのは、 $f(x) = 0$ の場合に限られる。ベクトルと同様に、ノルム (norm) を

$$\|f\| \equiv \sqrt{(f, f)} \quad (167)$$

で定義する。また、

$$(f, g) = 0 \quad (168)$$

のとき、 $f(x)$ と $g(x)$ は直交するという。

いま、関数 $\varphi_0(x), \varphi_1(x), \varphi_2(x), \dots, \varphi_n(x), \dots$ (n は整数) があって、それらが互いに直交するとき、すなわち、

$$(\varphi_m, \varphi_n) = 0, \quad (m \neq n \text{ のとき}) \quad (169)$$

が成り立つとき、関数の集合 $\{\varphi_n(x)\}$ が直交関数系をなすという。さらに、すべての n について、 $\|\varphi_n\| = 1$ であるとき、 $\{\varphi_n(x)\}$ を正規直交関数系 (略して正規直交系) という。正規直交系は、

$$(\varphi_m, \varphi_n) = \delta_{mn} \quad (170)$$

を満たす関数 $\{\varphi_n(x)\}$ の集合である。

例: 三角関数は、区間 $[-\pi, \pi]$ において、次の直交関係が成り立つ。

$$\frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \cos mx \cos nxdx = \begin{cases} 2 & (m = n = 0 \text{ のとき}) \\ \delta_{mn} & (\text{それ以外の場合}) \end{cases} \quad (171)$$

$$\frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \sin mx \sin nxdx = \delta_{mn} \quad (172)$$

$$\int_{-\pi}^{\pi} \sin mx \cos nxdx = 0 \quad (173)$$

これは、 \cos と \sin の加法定理

$$\cos \alpha \cos \beta = \frac{\cos(\alpha + \beta) + \cos(\alpha - \beta)}{2} \quad (174)$$

$$\sin \alpha \sin \beta = -\frac{\cos(\alpha + \beta) - \cos(\alpha - \beta)}{2} \quad (175)$$

$$\sin \alpha \cos \beta = \frac{\sin(\alpha + \beta) + \sin(\alpha - \beta)}{2} \quad (176)$$

よりすぐ分かる。したがって、関数系

$$\left\{ \frac{1}{\sqrt{2\pi}}, \frac{\cos x}{\sqrt{\pi}}, \frac{\sin x}{\sqrt{\pi}}, \frac{\cos 2x}{\sqrt{\pi}}, \frac{\sin 2x}{\sqrt{\pi}}, \dots \right\} \quad (177)$$

は区間 $[-\pi, \pi]$ で正規直交系をなす。

6.4 シュミットの直交化

区間 $[a, b]$ で与えられた関数系

$$u_0(x), u_1(x), u_2(x), \dots, u_n(x), \dots \quad (178)$$

が正規直交系でない場合、シュミットの直交化によって、正規直交系

$$\varphi_0(x), \varphi_1(x), \varphi_2(x), \dots, \varphi_n(x), \dots \quad (179)$$

を作り上げることができる。

まず、 $u_0(x)$ から、これを正規化して、

$$\varphi_0(x) = \frac{u_0(x)}{\|u_0\|} \quad (180)$$

とする。次に、

$$v_1(x) = u_1(x) - c\varphi_0(x) \quad (181)$$

とおき、

$$(\varphi_0, v_1) = 0 \quad (182)$$

となるように、定数 c を決める。

$$(\varphi_0, v_1) = (\varphi_0, u_1) - c(\varphi_0, \varphi_0) = (\varphi_0, u_1) - c = 0 \quad (183)$$

であるから、

$$c = (\varphi_0, u_1) \quad (184)$$

と選べばよい。したがって、

$$v_1(x) = u_1(x) - (\varphi_0, u_1)\varphi_0(x) \quad (185)$$

が得られる。この $v_1(x)$ を正規化して、 $\varphi_1(x)$ が得られる。

$$\varphi_1(x) = \frac{v_1(x)}{\|v_1\|} \quad (186)$$

あとは、同様にすればよい。

$$v_2(x) = u_2(x) - (\varphi_1, u_2)\varphi_1(x) - (\varphi_0, u_2)\varphi_0(x) \quad (187)$$

$$\varphi_2(x) = \frac{v_2(x)}{\|v_2\|} \quad (188)$$

というように。

6.5 直交関数系による関数の展開

いま区間 $[a, b]$ で定義された正規直交系

$$\varphi_0(x), \varphi_1(x), \varphi_2(x), \dots, \varphi_n(x), \dots \quad (189)$$

が与えられているとき、同じ区間で定義された連続な関数 $f(x)$ に対して

$$c_n = (\varphi_n, f) = \int_a^b \varphi_n(x)f(x)dx \quad (190)$$

とおき、

$$f(x) \sim \sum_{n=0}^{\infty} c_n \varphi_n(x) \quad (191)$$

と置く。このとき、関係式 (191) を一般フーリエ級数、あるいは単にフーリエ級数とよぶ。

6.6 完全系

与えられた正規直交関数系が完全であるとは、そのメンバーが全部そろっていることをいう。たとえば、正規直交系 (177) のなかから、何か一つの関数が抜けたとすると、任意の関数をフーリエ級数で展開できなくなる。逆に、任意の関数を展開できるためには、完全系でなければならない。完全系であるためには、任意の関数が展開できればよい。これは、ある正規直交系が

$$\sum_{n=0}^{\infty} \varphi_n(x)\varphi_n(y) = \delta(x-y) \quad (192)$$

が満たすことを証明できればよい。このとき、デルタ関数を使って、

$$\begin{aligned} \sum_{n=0}^{\infty} c_n \varphi_n(x) &= \sum_{n=0}^{\infty} \int_a^b \varphi_n(y) f(y) dy \varphi_n(x) = \int_a^b \sum_{n=0}^{\infty} \varphi_n(x)\varphi_n(y) f(y) dy \\ &= \int_a^b f(y) \delta(x-y) dy = f(x) \end{aligned} \quad (193)$$

となる。この関係が成り立つとき、

$$(f, f) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n^2 \quad (194)$$

となる。

関数 $f(x)$ と $g(x)$ が複素関数の場合には、内積を

$$(f, g) \equiv \int_a^b f(x)^* g(x) dx \quad (195)$$

と定義する。ここで $f(x)$ につけた $*$ は複素共役を意味する。これは、ノルムが自然に

$$(f, f) \equiv \int_a^b f(x)^* f(x) dx = \int_a^b |f(x)|^2 dx \quad (196)$$

となるからである。また、複素関数の正規直交系が完全であるためには、

$$\sum_{n=0}^{\infty} \varphi_n(x)^* \varphi_n(y) = \delta(x-y) \quad (197)$$

となる必要がある。

7 直交多項式

7.1 エルミート多項式

[母関数] 直交関数系の中でも、よく出てくる例として、エルミート (Hermite) 多項式を取り上げる。エルミート多項式の母関数は、

$$g(t, x) \equiv e^{2tx-t^2} = \sum_{n=0}^{\infty} H_n(x) \frac{t^n}{n!} \quad (198)$$

である。このような展開を使って n 次エルミート多項式を定義する場合、左辺の関数 $g(t, x)$ を母関数という。

この母関数を t と x の両方について展開して、式 (198) と比較する。

$$g(t, x) = \sum_p \frac{(2tx)^p}{p!} \sum_r \frac{(-t^2)^r}{r!} \quad (199)$$

となるので、 t の巾 (ベキ) 乗の指数を n とおくと、 $p = n - 2r$ となるので、

$$g(t, x) = \sum_n \sum_r \frac{(-1)^r (2x)^{n-2r}}{(n-2r)! r!} t^n \quad (200)$$

が得られる。これと、式 (198) を比較することで、

$$H_n(x) = \sum_{r=0}^{[n/2]} (-1)^r \frac{n!}{r!(n-2r)!} (2x)^{n-2r} \quad (201)$$

が求まる。ここで $[n]$ はガウス記号で、 n を超えない整数をあらわす。

実際に、エルミート多項式を n の小さい順にいくつか書くと、

$$\begin{aligned} H_0(x) &= 1 \\ H_1(x) &= 2x \\ H_2(x) &= 4x^2 - 2 \\ H_3(x) &= 8x^3 - 12x \\ H_4(x) &= 16x^4 - 48x^2 + 12 \end{aligned} \quad (202)$$

などとなる。一般化すると、

$$\begin{aligned} H_n(x) &= (2x)^n - \frac{n(n-1)}{1!} (2x)^{n-2} \\ &+ \frac{n(n-1)(n-2)(n-3)}{2!} (2x)^{n-4} + \dots \end{aligned} \quad (203)$$

となる。 $H_n(x)$ は n の偶奇にしたがって偶関数か奇関数になる。すなわち、

$$H_n(-x) = (-1)^n H_n(x) \quad (204)$$

[ロドリゲの公式] 母関数 $g(t, x)$ に対して、

$$f(t, x) \equiv e^{-(t-x)^2} = e^{-x^2} g(t, x) \quad (205)$$

を定義し、テイラー展開すると、

$$f(t, x) = \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{\partial^n f}{\partial t^n} \right)_{t=0} \frac{t^n}{n!} \quad (206)$$

となる。これを式 (198) と比べると、

$$H_n(x) = e^{x^2} \left(\frac{\partial^n f}{\partial t^n} \right)_{t=0} \quad (207)$$

となる。ところで、 $f(t, x)$ は t と x を $t - x$ の形で含むので、

$$\frac{\partial f}{\partial t} = -\frac{\partial f}{\partial x} \quad (208)$$

となる。これを n 階微分すると、

$$\frac{\partial^n f}{\partial t^n} = (-1)^n \frac{\partial^n f}{\partial x^n} \quad (209)$$

となるので、

$$H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \left(\frac{\partial^n f}{\partial x^n} \right)_{t=0} = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2} \quad (210)$$

となる。このように n 階微分を使って、

$$H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2} \quad (211)$$

とあらわすことを**ロドリグの公式**という。

[エルミート多項式の漸化式] エルミート多項式の漸化式は、

$$H_{n+1}(x) = 2xH_n(x) - 2nH_{n-1}(x) \quad (212)$$

$$H'_n(x) = 2nH_{n-1}(x) \quad (213)$$

$$H'_n(x) = 2xH_n(x) - H_{n+1}(x) \quad (214)$$

のように与えられる。これは、母関数を微分することで説明できる。

$$\frac{\partial g}{\partial t} = 2(x-t)g = \sum_{n=1}^{\infty} H_n(x) \frac{nt^{n-1}}{n!} \quad (215)$$

となるので、真中の式に g として、式 (198) を代入して、

$$\sum_{n=0}^{\infty} 2xH_n(x) \frac{t^n}{n!} - \sum_{n=0}^{\infty} 2H_n(x) \frac{t^{n+1}}{n!} = \sum_{n=1}^{\infty} H_n(x) \frac{t^{n-1}}{(n-1)!} \quad (216)$$

となるので、左辺第二項の n を $n-1$ と置き換え、右辺の n を $n+1$ と置き換えると、

$$\sum_{n=0}^{\infty} 2xH_n(x) \frac{t^n}{n!} - \sum_{n=1}^{\infty} 2H_{n-1}(x) \frac{t^n}{(n-1)!} = \sum_{n=0}^{\infty} H_{n+1}(x) \frac{t^n}{n!} \quad (217)$$

となる。これより、左辺第二項の分子分母に n を掛け、 t^n の係数がゼロになることを使うと、

$$\sum_{n=0}^{\infty} 2xH_n(x)\frac{t^n}{n!} - \sum_{n=1}^{\infty} 2nH_{n-1}(x)\frac{t^n}{n!} = \sum_{n=0}^{\infty} H_{n+1}(x)\frac{t^n}{n!} \quad (218)$$

から、式(212)が導ける。

また、

$$\frac{\partial g}{\partial x} = 2tg = \sum_{n=0}^{\infty} H'_n(x)\frac{t^n}{n!} \quad (219)$$

より、真中の式に g として、式(198)を前と同じように代入して、

$$\sum_{n=0}^{\infty} 2H_n(x)\frac{t^{n+1}}{n!} = \sum_{n=1}^{\infty} H'_n(x)\frac{t^n}{n!} \quad (220)$$

となるので、左辺の n を $n-1$ と置き換えると、

$$\sum_{n=1}^{\infty} 2H_{n-1}(x)\frac{t^n}{(n-1)!} = \sum_{n=1}^{\infty} H'_n(x)\frac{t^n}{n!} \quad (221)$$

となるので、左辺の分子分母に n を掛け、

$$\sum_{n=1}^{\infty} 2nH_{n-1}(x)\frac{t^n}{n!} = \sum_{n=1}^{\infty} H'_n(x)\frac{t^n}{n!} \quad (222)$$

より、式(213)を得る。

最後の漸化式(214)は、式(212)を式(213)に代入することで得られる。

[エルミート多項式の微分方程式] 漸化式(214)の両辺を x について微分すると、

$$H''_n(x) = 2xH'_n(x) + 2H_n(x) - H'_{n+1}(x) \quad (223)$$

となる。右辺の最後の項を式(213)で置き換えると、

$$H''_n(x) = 2xH'_n(x) + 2H_n(x) - 2(n+1)H_n(x) \quad (224)$$

となるので、結局 $H_n(x)$ は

$$H''_n(x) - 2xH'_n(x) + 2nH_n(x) = 0 \quad (225)$$

という2階の常微分方程式を満たすことになる。これをエルミートの微分方程式という。両辺に e^{-x^2} を掛けると、

$$\frac{d}{dx} \left(e^{-x^2} \frac{d}{dx} H_n(x) \right) + 2ne^{-x^2} H_n(x) = 0 \quad (226)$$

とも書ける。

[エルミート多項式の直交性] 直交多項式は、直交性という性質を持つ。エルミート多項式の場合は、

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} H_m(x) H_n(x) dx = \sqrt{\pi} 2^n n! \delta_{mn} \quad (227)$$

となる。これは、内積の定義が

$$(f, g) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} f(x) g(x) dx \quad (228)$$

と拡張されたことに対応している。ここで、 e^{-x^2} を重み関数とよぶ。

ここで、直交性を証明するために母関数を使う。いま、

$$g(t, x) g(s, x) = e^{2tx-t^2} e^{2sx-s^2} = \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} H_m(x) \frac{t^m}{m!} H_n(x) \frac{s^n}{n!} \quad (229)$$

の両辺に e^{-x^2} を掛け、 $-\infty$ から ∞ まで x について積分すると、

$$e^{-t^2-s^2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2+2(t+s)x} dx = \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{t^m}{m!} \frac{s^n}{n!} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} H_m(x) H_n(x) dx \quad (230)$$

となる。ここで、左辺は、

$$e^{-t^2-s^2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2+2(t+s)x} dx = e^{-t^2-s^2+(t+s)^2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-(x-t-s)^2} dx = e^{2ts} \sqrt{\pi} \quad (231)$$

と積分できるので、結局

$$\sqrt{\pi} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{2^n}{n!} t^n s^n = \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{t^m}{m!} \frac{s^n}{n!} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} H_m(x) H_n(x) dx \quad (232)$$

となり、式 (227) が証明できた。

エルミート多項式から、

$$u_n(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi} 2^n n!} H_n(x) \exp\left(-\frac{x^2}{2}\right) \quad (233)$$

という関数系をつくると、これらは通常の正規直交系をなす。つまり、

$$\int_{-\infty}^{\infty} u_m(x) u_n(x) dx = \delta_{mn} \quad (234)$$

この $u_n(x)$ は量子力学の 1 次元調和振動子の固有関数である。

[エルミート多項式のフーリエ変換] 式 (234) のフーリエ変換を (前の係数を取り去り)、

$$h_n(p) = \int_{-\infty}^{\infty} H_n(x) e^{-x^2/2} e^{ipx} dx \quad (235)$$

で定義すると、

$$h_n(p) = \sqrt{2\pi} i^n H_n(p) e^{-p^2/2} \quad (236)$$

となる。この証明は、母関数を使う。式 (235) の両辺に $t^n/n!$ を掛け、 n について加える。すると、

$$\sum_n h_n(p) \frac{t^n}{n!} = \int_{-\infty}^{\infty} \sum_n H_n(x) \frac{t^n}{n!} e^{-x^2/2} e^{ipx} dx \quad (237)$$

となり、母関数 (198) を使うと、

$$\sum_n h_n(p) \frac{t^n}{n!} = \int_{-\infty}^{\infty} e^{2tx-t^2} e^{-x^2/2} e^{ipx} dx \quad (238)$$

となる。右辺の指数関数の肩を整理すると、

$$\begin{aligned} \text{右辺} &= e^{t^2+2ipt-p^2/2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-(x-2t-ip)^2/2} dx \\ &= e^{t^2+2ipt-p^2/2} \sqrt{2\pi} = g(it, p) e^{-p^2/2} \sqrt{2\pi} \end{aligned} \quad (239)$$

となるので、式 (237) は、

$$\sum_n h_n(p) \frac{t^n}{n!} = \sqrt{2\pi} \sum_n H_n(p) \frac{(it)^n}{n!} e^{-p^2/2} \quad (240)$$

と変形できる。これより、式 (236) を示せた。

[エルミート多項式の積分表示] エルミート多項式は、

$$H_n(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-u^2} (2x+2iu)^n du \quad (241)$$

という積分表示で表すこともできる。この証明も母関数を使う。両辺に $t^n/n!$ を掛けて、 n について加えると、

$$\begin{aligned} \sum_n H_n(x) \frac{t^n}{n!} &= \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \sum_n \frac{t^n}{n!} e^{-u^2} (2x+2iu)^n du \\ &= \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-u^2} e^{(2x+2iu)t} du \\ &= e^{2xt-t^2} \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-(u-it)^2} du \\ &= e^{2xt-t^2} \frac{1}{\sqrt{\pi}} \sqrt{\pi} = g(t, x) \end{aligned} \quad (242)$$

となるので、式 (241) が成り立つことを示せた。

[エルミート多項式の完全性] 式 (233) の関数系は、完全性の条件

$$\sum_{n=0}^{\infty} u_n(x) u_n(y) = \delta(x-y) \quad (243)$$

を満たすことが証明できる。つまり、積分表示を使うと

$$\sum_{n=0}^{\infty} u_n(x) u_n(y) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-(x^2+y^2)/2} \sum_n \frac{H_n(x) H_n(y)}{2^n n!}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{e^{-(x^2+y^2)/2}}{\pi\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} du \int_{-\infty}^{\infty} dv e^{-u^2-v^2} \sum_n \frac{2^n (x+iu)^n (y+iv)^n}{2^n n!} \\
&= \frac{e^{-(x^2+y^2)/2}}{\pi\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} du \int_{-\infty}^{\infty} dv e^{-u^2-v^2+2(x+iu)(y+iv)} \quad (244)
\end{aligned}$$

となる。右辺の指数関数の肩は、

$$2xy - x^2 + 2iu(y-x) - (v+u-ix)^2 \quad (245)$$

と整理できる。まず、 v についての積分ができて、

$$\sum_{n=0}^{\infty} u_n(x)u_n(y) = \frac{e^{-(x^2+y^2)/2}}{\pi} e^{2xy-x^2} \int_{-\infty}^{\infty} du e^{2iu(y-x)} \quad (246)$$

となる。ここで式 (97)

$$2\pi\delta(x) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx} dk \quad (247)$$

の関係を使えば、

$$\begin{aligned}
\sum_{n=0}^{\infty} u_n(x)u_n(y) &= \frac{e^{-(x^2+y^2)/2}}{\pi} e^{2xy-x^2} \int_{-\infty}^{\infty} du e^{2iu(y-x)} \\
&= \frac{e^{-(x^2+y^2)/2}}{\pi} e^{2xy-x^2} \pi\delta(y-x) = \delta(x-y) \quad (248)
\end{aligned}$$

となり、完全性が示せた。

7.2 ルジャンドル多項式

[母関数]

ルジャンドル (Legendre) 多項式 $P_n(x)$ は $-1 \leq x \leq 1$ で定義される多項式である。その母関数は、

$$g(t, x) = \frac{1}{\sqrt{1-2tx+t^2}} = \sum_{n=0}^{\infty} P_n(x)t^n \quad (249)$$

で与えられる。ここで、 $-1 \leq t \leq 1$ である。この定義から、

$$y = 2tx - t^2 \quad (250)$$

とにおいて、

$$\begin{aligned} (1-y)^{-1/2} &= 1 + \frac{1}{2} \frac{y}{1!} + \frac{1 \cdot 3}{2 \cdot 2} \frac{y^2}{2!} + \frac{1 \cdot 3 \cdot 5}{2 \cdot 2 \cdot 2} \frac{y^3}{3!} + \frac{1 \cdot 3 \cdot 5 \cdot 7}{2 \cdot 2 \cdot 2 \cdot 2} \frac{y^4}{4!} + \dots \\ &= \sum_p \frac{(2p-1)!!}{2^p} \frac{y^p}{p!} = \sum_p \frac{(2p)!}{2^{2p}(p!)^2} y^p \end{aligned} \quad (251)$$

と展開できる。また、二項展開を使えば、

$$\begin{aligned} y^p &= t^p(2x-t)^p \\ &= t^p \sum_r C_{p,r}(2x)^{p-r}(-t)^r \\ &= \sum_r t^{p+r} \frac{p!(-1)^r}{r!(p-r)!} (2x)^{p-r} \end{aligned} \quad (252)$$

となるので、結局

$$g(t, x) = \sum_p \sum_r \frac{(2p)!}{2^{2p}(p!)^2} t^{p+r} \frac{p!(-1)^r}{r!(p-r)!} (2x)^{p-r} \quad (253)$$

と置けるので、 t の巾 (べき) が $p+r \rightarrow n$ となるように置き換えると、 $p = n-r$ となるので、

$$\begin{aligned} g(t, x) &= \sum_n \sum_r \frac{(2n-2r)!}{2^n(n-r)!} t^n \frac{(-1)^r}{r!(n-2r)!} (x)^{n-2r} \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} t^n \sum_{r=0}^{[n/2]} \frac{(2n-2r)!}{2^n(n-r)!} t^n \frac{(-1)^r}{r!(n-2r)!} (x)^{n-2r} \end{aligned} \quad (254)$$

となる。ここで、整数 r は、 $r=0$ の x^n よりはじまり、 $n-2r \geq 0$ の条件より、 $[n/2]$ ($[]$ はガウス記号で $n/2$ を超えない整数) までとなる。これより、

$$P_n(x) = \sum_{r=0}^{[n/2]} \frac{(-1)^r (2n-2r)!}{2^n r!(n-r)!(n-2r)!} x^{n-2r} \quad (255)$$

となる。

実際に求めてみると、

$$\begin{aligned}
 P_0(x) &= 1 \\
 P_1(x) &= \frac{2!}{2^1}x = x \\
 P_2(x) &= \frac{4!}{2^2 2! 2!}x^2 - \frac{2!}{2^2} = \frac{1}{2}(3x^2 - 1) \\
 P_3(x) &= \frac{6!}{2^3 3! 3!}x^3 - \frac{4!}{2^3 2! 1!}x = \frac{1}{2}(5x^3 - 3x) \\
 P_4(x) &= \frac{8!}{2^4 4! 4!}x^4 - \frac{6!}{2^4 3! 2!}x^2 + \frac{4!}{2^4 2! 2!} = \frac{1}{8}(35x^4 - 30x^2 + 3) \\
 &\dots
 \end{aligned} \tag{256}$$

と求まる。これらより、

$$P_n(-x) = (-1)^n P_n(x) \tag{257}$$

$$P_n(1) = 1 \tag{258}$$

となることも分かるだろう。

電磁気学への応用]

点電荷 Q がつくる電位は、その位置を $(0, 0, a)$ と置くと、

$$\varphi(x, y, z) = \frac{1}{\sqrt{x^2 + y^2 + (z - a)^2}} \tag{259}$$

で与えられる。定数の Q は 1 とした。極座標を使って、

$$x = r \sin \theta \cos \phi, \quad y = r \sin \theta \sin \phi, \quad z = r \cos \theta \tag{260}$$

と置けば、

$$\begin{aligned}
 x^2 + y^2 + (z - a)^2 &= r^2 \sin^2 \theta \cos^2 \phi + r^2 \sin^2 \theta \sin^2 \phi + r^2 \cos^2 \theta - 2ar \cos \theta + a^2 \\
 &= r^2 - 2ar \cos \theta + a^2 \\
 &= r^2 \left(1 - \frac{2a \cos \theta}{r} + \frac{a^2}{r^2}\right)
 \end{aligned} \tag{261}$$

となり、式 (249) で、 $t \rightarrow a/r$ および $x \rightarrow \cos \theta$ と置いたことに相当する。したがって、

$$\varphi = \sum_{n=0}^{\infty} P_n(\cos \theta) \frac{a^n}{r^{n+1}} \tag{262}$$

と展開できる。

もし、 $(0, 0, -a)$ にも $-Q$ という逆の電荷が存在すれば、定数の Q を 1 として、

$$\varphi(x, y, z) = \frac{1}{\sqrt{x^2 + y^2 + (z - a)^2}} - \frac{1}{\sqrt{x^2 + y^2 + (z + a)^2}} \tag{263}$$

となるので、式 (262) の展開を使って、

$$\varphi = \sum_{n=0}^{\infty} P_n(\cos \theta) \frac{a^n - (-a)^n}{r^{n+1}} \tag{264}$$

となるので、 n が偶数の場合は、ゼロとなる。さらに、十分遠方 ($r \rightarrow \infty$) であれば、

$$\varphi = P_1(\cos \theta) \frac{2a}{r^2} \quad (265)$$

の $n = 1$ の項のみ残り、電気双極子のつくる電位になる。

[ロドリグの公式] ルジャンドル多項式に対するロドリグの公式は、

$$P_n(x) = \frac{1}{2^n n!} \frac{d^n}{dx^n} (x^2 - 1)^n \quad (266)$$

である。この公式は、 $(x^2 - 1)^n$ を二項展開すると、

$$(x^2 - 1)^n = \sum_{r=0}^n {}_n C_r x^{2n-2r} (-1)^r \quad (267)$$

となる。この両辺を x で n 階微分すると、

$$\begin{aligned} \frac{d^n}{dx^n} (x^2 - 1)^n &= \sum_{r=0}^n {}_n C_r \frac{d^n}{dx^n} x^{2n-2r} (-1)^r \\ &= \sum_{r=0}^{[n/2]} \frac{n! (-1)^r}{r! (n-r)!} \frac{(2n-2r)!}{(n-2r)!} x^{n-2r} \end{aligned} \quad (268)$$

となる。これと、式 (255) を比較して、式 (266) を得る。

[ルジャンドル多項式の漸化式]

次のような漸化式がある。

$$(2n+1)xP_n(x) = (n+1)P_{n+1}(x) + nP_{n-1}(x) \quad (269)$$

$$\left[(1-x^2) \frac{d}{dx} - (n+1)x \right] P_n(x) = -(n+1)P_{n+1}(x) \quad (270)$$

$$\left[(1-x^2) \frac{d}{dx} + nx \right] P_n(x) = nP_{n-1}(x) \quad (271)$$

ここで、大カッコの中の演算子は、 $P_n(x)$ の次数 n を上げたり、下げたりするはたらきをもつので、上昇演算子、下降演算子などよばれたりする。これらの証明は、母関数を使うと容易にできる。まず、母関数を t について偏微分すると、

$$\frac{\partial g(t, x)}{\partial t} = \frac{x-t}{1-2tx+t^2} g(t, x) = \sum_{n=1}^{\infty} nP_n(x)t^{n-1} \quad (272)$$

となるので、これに式 (249) を代入すると、

$$(x-t) \sum_{n=0}^{\infty} P_n(x)t^n = (1-2tx+t^2) \sum_{n=1}^{\infty} nP_n(x)t^{n-1} \quad (273)$$

となる。これを

$$\sum_{n=0}^{\infty} [xP_n(x)t^n - P_n(x)t^{n+1}] = \sum_{n=1}^{\infty} [nP_n(x)t^{n-1} - 2nxP_n(x)t^n + nP_n(x)t^{n+1}] \quad (274)$$

とし、さらに t^n についてまとめると、

$$\sum_n [xP_n(x) - P_{n-1}(x) - (n+1)P_{n+1}(x) + 2nxP_n(x) - (n-1)P_{n-1}(x)] t^n = 0 \quad (275)$$

となるので、 t^n の係数が常にゼロになることを課すと、式 (269) を示すことができる。

次に、式 (270) の両辺に t^n を掛けて、 n について和をとると、

$$(1-x^2) \frac{d}{dx} \sum_n P_n(x)t^n - \sum_n (n+1)xP_n(x)t^n = - \sum_n (n+1)P_{n+1}(x)t^n \quad (276)$$

となるので、母関数を使って、

$$(1-x^2) \frac{\partial g}{\partial x} - x \frac{\partial (tg)}{\partial t} = - \frac{\partial g}{\partial t} \quad (277)$$

とかける。実際に、

$$\frac{\partial g}{\partial t} = \frac{x-t}{1-2tx+t^2} \cdot g \quad (278)$$

$$\frac{\partial g}{\partial x} = \frac{t}{1-2tx+t^2} \cdot g \quad (279)$$

となるので、これらを式 (277) に代入して、

$$(1-x^2)t - x \cdot (1-2tx+t^2) - xt \cdot (x-t) = -(x-t) \quad (280)$$

となっていることを示せばいいが、これは成立している。したがって、式 (270) が証明できた。

次に、式 (271) についても両辺に t^n を掛けて、 n について和をとると、

$$(1-x^2) \frac{d}{dx} \sum_n P_n(x)t^n + \sum_n nxP_n(x)t^n = \sum_n nP_{n-1}(x)t^n \quad (281)$$

となるので、母関数を使って、

$$(1-x^2) \frac{\partial g}{\partial x} + tx \frac{\partial g}{\partial t} = t \frac{\partial (tg)}{\partial t} \quad (282)$$

とかける。偏微分を代入すると、

$$(1-x^2) \cdot t + tx \cdot (x-t) = t \cdot (1-2tx+t^2) + t^2 \cdot (x-t) \quad (283)$$

となっていることを示せばいいが、これは成立している。したがって、式 (271) も証明できた。

[ルジャンドル多項式の微分方程式]

ルジャンドル多項式が満たす微分方程式は、まず、式 (270) で $n \rightarrow n-1$ として、

$$\left[(1-x^2) \frac{d}{dx} - nx \right] P_{n-1}(x) = -nP_n(x) \quad (284)$$

となる。この両辺に n を掛けて、式 (271) を代入すると、

$$\left[(1-x^2) \frac{d}{dx} - nx \right] \left[(1-x^2) \frac{d}{dx} + nx \right] P_n(x) = -n^2 P_n(x) \quad (285)$$

を得る。これをバラすと、

$$\left[(1-x^2) \frac{d}{dx} - nx \right] [(1-x^2) P_n'(x) + nx P_n(x)] = -n^2 P_n(x) \quad (286)$$

$$\begin{aligned} & (1-x^2)^2 P_n''(x) - (1-x^2) 2x P_n'(x) - nx(1-x^2) P_n'(x) \\ & + nx(1-x^2) P_n'(x) + n(1-x^2) P_n(x) - n^2 x^2 P_n(x) \\ & = -n^2 P_n(x) \end{aligned} \quad (287)$$

となる。右辺の項を左辺に持って来て、 $(1-x^2)$ で割算すると、

$$\begin{aligned} & (1-x^2) P_n''(x) - 2x P_n'(x) - nx P_n'(x) + nx P_n'(x) + n P_n(x) + n^2 P_n(x) \\ & = 0 \end{aligned} \quad (288)$$

つまり、

$$(1-x^2) P_n''(x) - 2x P_n'(x) + n(n+1) P_n(x) = 0 \quad (289)$$

を得る。これをルジャンドルの微分方程式という。また、この方程式は、

$$\frac{d}{dx} \left[(1-x^2) \frac{dP_n(x)}{dx} \right] + n(n+1) P_n(x) = 0 \quad (290)$$

とも書ける。

[ルジャンドル多項式の直交性]

ルジャンドル多項式の直交性は、

$$\int_{-1}^1 P_m(x) P_n(x) dx = \frac{2}{2n+1} \delta_{mn} \quad (291)$$

と表すことができる。この証明は母関数を使っておこなう。

$$\sum_{m=0}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} t^m s^n \int_{-1}^1 P_m(x) P_n(x) dx = \int_{-1}^1 \frac{1}{\sqrt{1-2tx+t^2}} \frac{1}{\sqrt{1-2sx+s^2}} dx \quad (292)$$

であるが、右辺の積分は、不定積分の公式

$$\int \frac{dx}{\sqrt{a-x}\sqrt{b-x}} = -2 \log(\sqrt{a-x} + \sqrt{b-x}) \quad (293)$$

を使って、

$$a = \frac{1+t^2}{2t}, \quad b = \frac{1+s^2}{2s} \quad (294)$$

と変数変換すると、

$$\int_{-1}^1 \frac{1}{\sqrt{1-2tx+t^2}} \frac{1}{\sqrt{1-2sx+s^2}} dx$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{2\sqrt{st}} \left[-2 \log(\sqrt{a-x} + \sqrt{b-x}) \right]_{-1}^1 \\
&= \frac{1}{\sqrt{st}} \log \frac{\sqrt{a+1} + \sqrt{b+1}}{\sqrt{a-1} + \sqrt{b-1}} \\
&= \frac{1}{\sqrt{st}} \log \frac{(t+1)\sqrt{s} + (s+1)\sqrt{t}}{(1-t)\sqrt{s} + (1-s)\sqrt{t}} \\
&= \frac{1}{\sqrt{st}} \log \frac{t\sqrt{s} + \sqrt{s} + s\sqrt{t} + \sqrt{t}}{\sqrt{s} - t\sqrt{s} + \sqrt{t} - s\sqrt{t}} \\
&= \frac{1}{\sqrt{st}} \log \frac{(1 + \sqrt{st})(\sqrt{s} + \sqrt{t})}{(1 - \sqrt{st})(\sqrt{s} + \sqrt{t})} \\
&= \frac{1}{\sqrt{st}} \log \frac{1 + \sqrt{st}}{1 - \sqrt{st}} \\
&= \frac{1}{\sqrt{st}} \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{(-1)^{n-1}}{n} (st)^{n/2} - \frac{(-1)^{n-1}}{n} (-1)^n (st)^{n/2} \right) \\
&= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{2}{2k+1} (st)^k \tag{295}
\end{aligned}$$

ここで、 $n = 2k + 1$ と置いた。これと、式 (292) を比較することで、式 (291) を証明できた。

[ルジャンドル多項式の完全性]

『ワイヤシュトラスの近似定理: 区間 $a \leq x \leq b$ において、 $f(x)$ は連続とする。任意の $\varepsilon > 0$ をとるとき、区間 $a \leq x \leq b$ において、常に

$$|f(x) - P(x)| < \varepsilon \tag{296}$$

となる多項式 $P(x)$ が存在する。』というものがある。(証明は省略。)

さらに多項式は、関数系 $\{1, x, x^2, x^3, \dots\}$ から生成されることを理解すれば、ワイヤシュトラスの定理は、「閉区間において関数系 $\{1, x, x^2, x^3, \dots\}$ が完全である」ことを意味する。ルジャンドル多項式は、関数系 $\{1, x, x^2, x^3, \dots\}$ を直交化して得られる多項式であるので、完全直交系であることが分かる。

したがって、区間 $-1 \leq x \leq 1$ において定義された関数 $f(x)$ はルジャンドル多項式 $P_n(x)$ によって

$$f(x) = \sum_n c_n P_n(x) \tag{297}$$

と展開できる。係数 c_n は、

$$c_n = \frac{2n+1}{2} \int_{-1}^1 f(x) P_n(x) dx \tag{298}$$

により、計算できる。特に、 $f(x)$ が p 次多項式の場合には、式 (297) の右辺で p 次を超えるルジャンドル多項式があらわれないので、 $n > p$ に対して、 $c_n = 0$ となる。すなわち、

$$\int_{-1}^1 x^p P_n(x) dx = 0, \quad \text{for } p < n \tag{299}$$

7.3 ラゲール多項式

[母関数]

ラゲール (Laguerre) 多項式 $L_n(x)$ の母関数は、

$$g(t, x) = \frac{1}{1-t} \exp\left(-\frac{xt}{1-t}\right) = \sum_{n=0}^{\infty} L_n(x) \frac{t^n}{n!} \quad (300)$$

で与えられる。テイラー展開を使えば、母関数は

$$g(t, x) = \sum_r (-1)^r \frac{x^r}{r!} \frac{t^r}{(1-t)^{r+1}} \quad (301)$$

となる。これは、さらにテイラー展開で

$$\begin{aligned} (1-t)^{-N} &= 1 + N \frac{t}{1!} + N(N+1) \frac{t^2}{2!} + \dots \\ &= \sum_p \frac{(N+p-1)!}{(N-1)! p!} t^p \end{aligned} \quad (302)$$

となる。よって、

$$\begin{aligned} \frac{t^N}{(1-t)^{N+1}} &= \sum_p \frac{(N+p)!}{N! p!} t^{p+N} \\ &= \sum_n \frac{n!}{N!(n-N)!} t^n \end{aligned} \quad (303)$$

となる。ここで、 $n = p + N$ とおいたので、 $p = n - N$ となる。これを、式 (301) に代入して、

$$\begin{aligned} g(t, x) &= \sum_{r=0}^{\infty} (-1)^r \frac{x^r}{r!} \sum_n \frac{n!}{r!(n-r)!} t^n \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{r=0}^n (-1)^r \frac{(n!)^2}{(r!)^2 (n-r)!} x^r \frac{t^n}{n!} \end{aligned} \quad (304)$$

となる。ここで、 n と r についての和の順序を入れ替えたが、 $n - r \geq 0$ を満たさねばならないので、上記のようになる。これより、ラゲール多項式は、

$$L_n(x) = \sum_{r=0}^n (-1)^r \frac{(n!)^2}{(r!)^2 (n-r)!} x^r \quad (305)$$

とあらわせる。

ラゲール多項式の最初の 4 つは、

$$\begin{aligned} L_0(x) &= 1 \\ L_1(x) &= \frac{(1!)^2}{(0!)^2 1!} - \frac{(1!)^2}{(1!)^2 0!} x = 1 - x \\ L_2(x) &= \frac{(2!)^2}{(0!)^2 2!} - \frac{(2!)^2}{(1!)^2 1!} x + \frac{(2!)^2}{(2!)^2 0!} x^2 = 2 - 4x + x^2 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
L_3(x) &= \frac{(3!)^2}{(0!)^2 3!} - \frac{(3!)^2}{(1!)^2 2!} x + \frac{(3!)^2}{(2!)^2 1!} x^2 - \frac{(3!)^2}{(3!)^2 0!} x^3 = 6 - 18x + 9x^2 - x^3 \\
L_4(x) &= \dots
\end{aligned} \tag{306}$$

となる。

[ロドリグの公式] ラゲール多項式に対するロドリグの公式は、

$$L_n(x) = e^x \frac{d^n}{dx^n} (x^n e^{-x}) \tag{307}$$

である。この公式の右辺は、ライプニッツの微分公式を用いて、

$$\frac{d^n}{dx^n} (x^n e^x) = \sum_r C_{n,r} \frac{d^{n-r}}{dx^{n-r}} (x^n) \cdot \frac{d^r}{dx^r} (e^{-x}) \tag{308}$$

と展開できる。ここで、

$$\frac{d^{n-r}}{dx^{n-r}} x^n = \frac{n!}{r!} x^r \tag{309}$$

および

$$\frac{d^r}{dx^r} e^{-x} = (-1)^r e^{-x} \tag{310}$$

となるので、代入して、

$$e^x \frac{d^n}{dx^n} (x^n e^x) = \sum_r C_{n,r} (-1)^r \frac{n!}{r!} x^r = \sum_r (-1)^r \frac{(n!)^2}{(r!)^2 (n-r)!} x^r \tag{311}$$

を得る。これと、式 (305) を比較して、式 (307) を得る。

[ラゲール多項式の漸化式]

漸化式は次のようになる。

$$L_{n+1}(x) = (2n+1-x)L_n(x) - n^2 L_{n-1}(x) \tag{312}$$

$$\left(x \frac{d}{dx} + n + 1 - x\right) L_n(x) = L_{n+1}(x) \tag{313}$$

$$\left(x \frac{d}{dx} - n\right) L_n(x) = -n^2 L_{n-1}(x) \tag{314}$$

ここで、大カッコの中の演算子は、 $L_n(x)$ の次数 n を上げたり、下げたりするはたらきをもつので、上昇演算子、下降演算子などよばれたりする。これらの証明は、母関数を使うと容易にできる。まず、母関数の対数をとると、

$$\log g(x, t) + \log(1-t) + \frac{xt}{1-t} = 0 \tag{315}$$

となる。これを t について偏微分すると、

$$\frac{1}{g} \frac{\partial g}{\partial t} + \frac{-1}{1-t} + \frac{x}{1-t} + \frac{xt}{(1-t)^2} = 0 \tag{316}$$

となるので、まとめて

$$(1-t)^2 \frac{\partial g(t, x)}{\partial t} + (x-1+t)g(x, t) = 0 \quad (317)$$

となる。これに式 (300) を代入すると、

$$(1-t)^2 \sum_{n=1}^{\infty} L_n(x) \frac{t^{n-1}}{(n-1)!} + (x-1+t) \sum_{n=0}^{\infty} L_n(x) \frac{t^n}{n!} = 0 \quad (318)$$

となる。これを各項ごとに

$$\begin{aligned} & \sum_{n=0}^{\infty} L_{n+1}(x) \frac{t^n}{n!} + \sum_{n=1}^{\infty} (-2n)L_n(x) \frac{t^n}{n!} + \sum_{n=2}^{\infty} n(n-1)L_{n-1}(x) \frac{t^n}{n!} \\ & + \sum_{n=0}^{\infty} xL_n(x) \frac{t^n}{n!} + \sum_{n=0}^{\infty} L_n(x) \frac{t^n}{n!} + \sum_{n=1}^{\infty} nL_{n-1}(x) \frac{t^n}{n!} = 0 \end{aligned} \quad (319)$$

とし、さらに t^n についてまとめると、

$$L_{n+1}(x) - 2nL_n(x) + n(n-1)L_{n-1}(x) + xL_n(x) - L_n(x) + nL_{n-1}(x) = 0 \quad (320)$$

となるので、式 (312) を示すことができる。

次に、式 (313) の両辺に $t^n/n!$ を掛けて、 n について和をとると、

$$x \frac{\partial}{\partial x} \sum_n L_n(x) \frac{t^n}{n!} + \sum_n (n+1-x)L_n(x) \frac{t^n}{n!} = \sum_n L_{n+1}(x) \frac{t^n}{n!} \quad (321)$$

となるので、母関数を使って、さらにまとめて、

$$x \frac{\partial g}{\partial x} + \sum_n (n+1)L_n(x) \frac{t^n}{n!} - xg = \sum_n L_n(x) \frac{t^{n-1}}{(n-1)!} \quad (322)$$

となる。ここで、もう一度、母関数を使って、

$$x \frac{\partial g}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial t}(tg) - xg = \sum_n nL_n(x) \frac{t^{n-1}}{n!} \quad (323)$$

$$x \frac{\partial g}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial t}(tg) - xg = \frac{\partial g}{\partial t} \quad (324)$$

となる。母関数 $g(x, t)$ がこの関係式を満たすことをいえばよい。実際に、

$$\frac{\partial g}{\partial t} = -\frac{x-1+t}{(1-t)^2} \cdot g \quad (325)$$

$$\frac{\partial g}{\partial x} = -\frac{t}{1-t} \cdot g \quad (326)$$

となるので、これらを式 (324) に代入して、

$$-x \cdot t(1-t) + (1-t)^2 - t \cdot (x-1+t) - x \cdot (1-t)^2 = -(x-1+t) \quad (327)$$

となっていることを示せばいい。1-t についてまとめると、

$$-xt(1-t) + (1-x)(1-t)^2 - tx + t(1-t) = -x + (1-t) \quad (328)$$

$$(-xt + t - 1)(1-t) + (1-x)(1-t)^2 - tx + x = 0 \quad (329)$$

$$(-xt + t - 1)(1-t) + (1-x)(1-t)^2 + (1-t)x = 0 \quad (330)$$

$$(-xt + x + t - 1)(1-t) + (1-x)(1-t)^2 = 0 \quad (331)$$

$$((1-t)x - 1 + t)(1-t) + (1-x)(1-t)^2 = 0 \quad (332)$$

$$-(1-x)(1-t)^2 + (1-x)(1-t)^2 = 0 \quad (333)$$

これは成立している。したがって、式 (324) が証明できた。

次に、式 (314) についても両辺に $t^n/n!$ を掛けて、 n について和をとると、

$$x \frac{\partial}{\partial x} \sum_n L_n(x) \frac{t^n}{n!} - \sum_n n L_n(x) \frac{t^n}{n!} = - \sum_n n^2 L_{n-1}(x) \frac{t^n}{n!} \quad (334)$$

となるので、母関数を使って、

$$x \frac{\partial g}{\partial x} - t \frac{\partial g}{\partial t} = - \sum_n n L_{n-1}(x) \frac{t^n}{(n-1)!} \quad (335)$$

$$x \frac{\partial g}{\partial x} - t \frac{\partial g}{\partial t} = - \sum_n (n+1) L_n(x) \frac{t^{n+1}}{n!} \quad (336)$$

$$x \frac{\partial g}{\partial x} - t \frac{\partial g}{\partial t} = -t \frac{\partial}{\partial t} (tg) \quad (337)$$

とかける。 g の x および t に関する偏微分を代入すると、

$$-x \cdot t(1-t) + t \cdot (x-1+t) = -t \cdot (1-t)^2 + t^2 \cdot (x-1+t) \quad (338)$$

これを 1-t についてまとめると、

$$-xt(1-t) + tx - t(1-t) = -t \cdot (1-t)^2 + t^2 x - t^2(1-t) \quad (339)$$

$$(-xt - t + t^2)(1-t) + tx - t^2 x + t(1-t)^2 = 0 \quad (340)$$

$$(-xt - t + t^2)(1-t) + tx(1-t) + t(1-t)^2 = 0 \quad (341)$$

$$-t(1-t)(1-t) + t(1-t)^2 = 0 \quad (342)$$

となっているので、これは成立している。したがって、式 (314) も証明できた。

[ラゲール多項式の微分方程式]

ラゲール多項式が満たす微分方程式は、まず、式 (313) で $n \rightarrow n-1$ として、

$$\left[x \frac{d}{dx} + n - x \right] L_{n-1}(x) = L_n(x) \quad (343)$$

となる。この両辺に $-n^2$ を掛けて、式 (314) を代入すると、

$$\left[x \frac{d}{dx} + n - x \right] \left[x \frac{d}{dx} - n \right] L_n(x) = -n^2 L_n(x) \quad (344)$$

を得る。これをバラすと、

$$\left[x \frac{d}{dx} + n - x \right] [xL'_n(x) - nL_n(x)] = -n^2 L_n(x) \quad (345)$$

$$x^2 L''_n(x) + xL'_n(x) + (n-x)xL'_n(x) - xnL'_n(x) - n(n-x)L_n(x) = -n^2 L_n(x) \quad (346)$$

$$x^2 L''_n(x) + x(1-x)L'_n(x) + nL_n(x) = 0 \quad (347)$$

$$xL''_n(x) + (1-x)L'_n(x) + nL_n(x) = 0 \quad (348)$$

となる。これが、ラゲール多項式が満たす微分方程式であり、ラゲールの微分方程式ともいう。また、この方程式は、

$$\frac{d}{dx} \left[x e^{-x} \frac{dL_n(x)}{dx} \right] + n e^{-x} L_n(x) = 0 \quad (349)$$

とも書ける。

[ラゲール多項式の直交性]

ラゲール多項式の直交性は、

$$\int_0^\infty L_m(x) L_n(x) e^{-x} dx = (n!)^2 \delta_{mn} \quad (350)$$

と表すことができる。ここでは、半無限区間 $0 \leq x < \infty$ での積分により、内積

$$(f, g) = \int_0^\infty f(x) g(x) e^{-x} dx \quad (351)$$

を拡張定義している。直交性の証明は母関数を使っておこなう。

$$\sum_{m=0}^\infty \sum_{n=0}^\infty \frac{t^m s^n}{m! n!} \int_0^\infty L_m(x) L_n(x) e^{-x} dx = \int_0^\infty dx \frac{1}{1-t} \exp\left(-\frac{xt}{1-t}\right) \frac{1}{1-s} \exp\left(-\frac{xs}{1-s}\right) \quad (352)$$

であるが、右辺の積分は、

$$\begin{aligned} & \frac{1}{1-t} \frac{1}{1-s} \int_0^\infty dx \exp\left(-1 - \frac{t}{1-t}x - \frac{s}{1-s}x\right) \\ &= \frac{1}{1-t} \frac{1}{1-s} \left(1 + \frac{t}{1-t} + \frac{s}{1-s}\right)^{-1} \\ &= \frac{1}{1-ts} \\ &= \sum_{n=0}^\infty t^n s^n \end{aligned} \quad (353)$$

となるので、式 (352) を比較することで、式 (350) を証明できた。

7.4 ラゲール陪多項式

[定義]

ラゲール (Laguerre) 陪多項式は、ラゲール多項式 $L_n(x)$ を微分して得られる。

$$L_n^k(x) = \frac{d^k}{dx^k} L_n(x) \quad (354)$$

ここで、 $k = 0, 1, 2, \dots, n$ である。 $k = 0$ はラゲール多項式である。

$$L_n^0(x) = L_n(x) \quad (355)$$

[母関数]

ラゲール陪多項式の母関数は、ラゲール多項式の母関数である式 (300) の k 階導関数を t^k で割って得られる。すなわち、

$$t^{-k} \frac{\partial^k}{\partial x^k} g(t, x) = \frac{(-1)^k}{(1-t)^{k+1}} \exp\left(-\frac{xt}{1-t}\right) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{d^k}{dx^k} L_n(x) \frac{t^{n-k}}{n!} \quad (356)$$

となる。左辺をあらためて母関数 g と置き直せば、

$$g(x, t) = \frac{(-1)^k}{(1-t)^{k+1}} \exp\left(-\frac{xt}{1-t}\right) = \sum_{n=0}^{\infty} L_n^k(x) \frac{t^{n-k}}{n!} \quad (357)$$

となる。

なお、ラゲール陪多項式は k が必ず整数であるが、整数でない場合にソニン多項式とよび、整数とは限らないパラメーター α をつかって、母関数

$$\frac{1}{(1-t)^{\alpha+1}} \exp\left(-\frac{xt}{1-t}\right) = \sum_{n=0}^{\infty} L_n^{(\alpha)}(x) t^n \quad (358)$$

より定義される。右肩に (α) と、カッコがあることに注意。ラゲール陪多項式とソニン多項式の間の関係は、

$$L_n^k(x) = (-1)^k n! L_{n-k}^{(\alpha)}(x) \quad (359)$$

である。時には、ソニン多項式をラゲール陪多項式とよぶこともあるので注意。

[ラゲール陪多項式の漸化式]

漸化式は次のようになる。

$$\left(1 - \frac{k}{n+1}\right) L_{n+1}^k(x) + (x + k - 2n - 1) L_n^k(x) + n^2 L_{n-1}^k(x) = 0 \quad (360)$$

$$\left(x \frac{d}{dx} - x + n + 1\right) L_n^k(x) = \left(1 - \frac{k}{n+1}\right) L_{n+1}^k(x) \quad (361)$$

$$\left(x \frac{d}{dx} - n + k\right) L_n^k(x) = -n^2 L_{n-1}^k(x) \quad (362)$$

ここで、大カッコの中の演算子は、 $L_n^k(x)$ の次数 n を上げたり、下げたりするはたらきをもつので、上昇演算子、下降演算子、あるいは併せて昇降演算子とよばれたりする。これらの証明は、ラゲール多項式の場合と同じように、母関数を使うと容易にできる。まず、母関数の対数をとると、

$$\log g(x, t) + (k+1) \log(1-t) = k \log(-1) - \frac{xt}{1-t} \quad (363)$$

となる。これを t について偏微分すると、

$$\frac{1}{g} \frac{\partial g}{\partial t} = \frac{k+1}{1-t} - \frac{x}{1-t} - \frac{xt}{(1-t)^2} \quad (364)$$

$$\frac{1}{g} \frac{\partial g}{\partial t} = \frac{k+1}{1-t} - \frac{x}{(1-t)^2} \quad (365)$$

となるので、まとめて

$$(1-t)^2 \frac{\partial g(t, x)}{\partial t} + (x - (k+1)(1-t)) g(x, t) = 0 \quad (366)$$

となる。これに式 (357) を代入すると、

$$(1-t)^2 \sum_{n=k+1}^{\infty} (n-k) L_n^k(x) \frac{t^{n-k-1}}{n!} + (x - (k+1)(1-t)) \sum_{n=k}^{\infty} L_n^k(x) \frac{t^{n-k}}{n!} = 0 \quad (367)$$

となる。これを各項ごとバラして

$$\begin{aligned} & \sum_{n=k+1}^{\infty} (n-k) L_n^k(x) \frac{t^{n-k-1}}{n!} + \sum_{n=k+1}^{\infty} (-2(n-k)) L_n^k(x) \frac{t^{n-k}}{n!} \\ & + \sum_{n=k+1}^{\infty} (n-k) L_n^k(x) \frac{t^{n-k+1}}{n!} + \sum_{n=k}^{\infty} (x - (k+1)) L_n^k(x) \frac{t^{n-k}}{n!} \\ & + \sum_{n=k}^{\infty} (k+1) L_n^k(x) \frac{t^{n-k+1}}{n!} = 0 \end{aligned} \quad (368)$$

となる。第一項の $n \rightarrow n+1$ とし、第三項と第五項の $n \rightarrow n-1$ とすると、

$$\begin{aligned} & \sum_{n=k}^{\infty} \frac{n-k+1}{n+1} L_{n+1}^k(x) \frac{t^{n-k}}{n!} + \sum_{n=k+1}^{\infty} (-2(n-k)) L_n^k(x) \frac{t^{n-k}}{n!} \\ & + \sum_{n=k+2}^{\infty} n(n-k-1) L_{n-1}^k(x) \frac{t^{n-k}}{n!} + \sum_{n=k}^{\infty} (x - (k+1)) L_n^k(x) \frac{t^{n-k}}{n!} \\ & + \sum_{n=k+1}^{\infty} n(k+1) L_{n-1}^k(x) \frac{t^{n-k}}{n!} = 0 \end{aligned} \quad (369)$$

とし、さらに $t^{n-k}/n!$ について、

$$\left(1 - \frac{k}{n+1}\right) L_{n+1}^k(x) - 2(n-k) L_n^k(x) + n(n-k-1) L_{n-1}^k(x)$$

$$+ (x - k - 1)L_n^k(x) + n(k + 1)L_{n-1}^k(x) = 0 \quad (370)$$

となるので、さらにまとめて、

$$\begin{aligned} & \left(1 - \frac{k}{n+1}\right)L_{n+1}^k(x) + (-2n + 2k + x - k - 1)L_n^k(x) \\ & + (nk + n + n^2 - nk - n)L_{n-1}^k(x) = 0 \end{aligned} \quad (371)$$

となるので、式 (360) を示すことができる。

次に、式 (363) の x 偏微分をとると、

$$\frac{1}{g} \frac{\partial g}{\partial x} = -\frac{t}{1-t} \quad (372)$$

となるので、これを使えば、漸化式 (361) および、漸化式 (362) を示すことができる。これをテスト問題とする。

[ラゲール陪多項式の微分方程式]

ラゲール多項式が満たす微分方程式は、まず、式 (361) で $n \rightarrow n-1$ として、

$$\left(x \frac{d}{dx} - x + n\right) L_{n-1}^k(x) = \left(1 - \frac{k}{n}\right) L_n^k(x) \quad (373)$$

となる。この両辺に $-n^2$ を掛けて、式 (362) を代入すると、

$$\left(x \frac{d}{dx} - n + k\right) L_n^k(x) = -n^2 L_{n-1}^k(x) \quad (374)$$

$$\left[x \frac{d}{dx} + n - x\right] L_{n-1}^k(x) = L_n(x) \quad (375)$$

となる。

$$\left[x \frac{d}{dx} - x + n\right] \left[x \frac{d}{dx} - n + k\right] L_n^k(x) = -n^2 \left(1 - \frac{k}{n}\right) L_n^k(x) \quad (376)$$

を得る。これをバラすと、

$$\left[x \frac{d}{dx} + n - x\right] \left[x \frac{d}{dx} L_n^k(x) - (n-k)L_n^k(x)\right] = -n(n-k)L_n^k(x) \quad (377)$$

$$\begin{aligned} & x^2 \frac{d^2}{dx^2} L_n^k(x) + x \frac{d}{dx} L_n^k(x) + x(n-x) \frac{d}{dx} L_n^k(x) - (n-k)x \frac{d}{dx} L_n^k(x) \\ & - (n-x)(n-k)L_n^k(x) + n(n-k)L_n^k(x) = 0 \end{aligned} \quad (378)$$

$$\begin{aligned} & x^2 \frac{d^2}{dx^2} L_n^k(x) + (x + nx - x^2 - nx + kx) \frac{d}{dx} L_n^k(x) \\ & + (n - n + x)(n - k)L_n^k(x) = 0 \end{aligned} \quad (379)$$

この両辺を x で割り、さらにまとめて、

$$x \frac{d^2}{dx^2} L_n^k(x) + (k + 1 - x) \frac{d}{dx} L_n^k(x) + (n - k)L_n^k(x) = 0 \quad (380)$$

となる。これが、ラゲール陪多項式が満たす微分方程式であり、ラゲール陪微分方程式という。また、この方程式は、

$$\frac{d}{dx} \left[x^{k+1} e^{-x} \frac{dL_n^k(x)}{dx} \right] + (n-k)x^k e^{-x} L_n^k(x) = 0 \quad (381)$$

とも書ける。

[ラゲール陪多項式の直交性]

ラゲール陪多項式の直交性は、

$$\int_0^\infty L_m^k(x) L_n^k(x) x^k e^{-x} dx = \frac{(n!)^3}{(n-k)!} \delta_{mn} \quad (382)$$

と表すことができる。ここでは、半無限区間 $0 \leq x < \infty$ での積分により、内積

$$(f, g) = \int_0^\infty f(x)g(x)x^k e^{-x} dx \quad (383)$$

を拡張定義している。直交性の証明は母関数を使っておこなう。

$$\begin{aligned} & \sum_{m=k}^\infty \sum_{n=k}^\infty \frac{t^{m-k} s^{n-k}}{m!n!} \int_0^\infty L_m^k(x) L_n^k(x) x^k e^{-x} dx \\ &= \int_0^\infty x^k e^{-x} dx \frac{(-1)^k}{(1-t)^{k+1}} \exp\left(-\frac{xt}{1-t}\right) \\ & \times \frac{(-1)^k}{(1-s)^{k+1}} \exp\left(-\frac{xs}{1-s}\right) \end{aligned} \quad (384)$$

なので、右辺の積分は、

$$\begin{aligned} I_k &= \frac{1}{(1-t)^{k+1}} \frac{1}{(1-s)^{k+1}} \int_0^\infty x^k dx \exp\left(-1 - \frac{t}{1-t} - \frac{s}{1-s}\right) x \\ &= \frac{1}{(1-t)^{k+1}} \frac{1}{(1-s)^{k+1}} \left(1 + \frac{t}{1-t} + \frac{s}{1-s}\right)^{-1} \int_0^\infty kx^{k-1} dx \exp\left(-1 - \frac{t}{1-t} - \frac{s}{1-s}\right) x \\ &= \frac{1}{1-t} \frac{1}{1-s} \left(1 + \frac{t}{1-t} + \frac{s}{1-s}\right)^{-1} kI_{k-1} \\ &= \frac{k}{1-ts} I_{k-1} \\ &= \frac{k!}{(1-ts)^k} I_0 \\ &= \frac{k!}{(1-ts)^{k+1}} \end{aligned} \quad (385)$$

となる。式 (384) の両辺に $(ts)^k$ を掛けると、

$$\begin{aligned} & \sum_{m=k}^\infty \sum_{n=k}^\infty \frac{t^m s^n}{m!n!} \int_0^\infty L_m^k(x) L_n^k(x) x^k e^{-x} dx \\ &= \frac{k!(ts)^k}{(1-ts)^{k+1}} \\ &= \sum_{p=0}^\infty \frac{k!(k+p)!}{k!p!} t^{p+k} s^{p+k} \end{aligned}$$

$$= \sum_{n=k}^{\infty} \frac{n!}{(n-k)!} t^n s^n \quad (386)$$

ここで、最後の式変形で、 $k+p \rightarrow n$ と置いた。したがって、 $p = n - k$ となる。ここで、各項を比較して、式(382)を証明できた。

7.5 水素原子の波動関数

量子力学のシュレーディンガー方程式を水素原子に適用した場合に、その波動関数の解がラゲール陪多項式となっている。水素原子に対するシュレーディンガー方程式を球座標であらわし、変数分離すると、動径成分 $\varphi(r)$ に対する波動方程式は、

$$\left[-\frac{1}{2} \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d}{dr} \right) + \frac{\ell(\ell+1)}{2r^2} - \frac{1}{r} \right] \varphi(r) = E\varphi(r) \quad (387)$$

と書ける。ここでは、原子単位

$$m = \hbar = e = 1 \quad (388)$$

を採用した。

ここで、

$$E = -\frac{1}{2n^2} \quad (389)$$

$$r = \frac{n}{2}\rho \quad (390)$$

と置き換えると、

$$\left[-\frac{2}{n^2} \frac{1}{\rho^2} \frac{d}{d\rho} \left(\rho^2 \frac{d}{d\rho} \right) + \frac{2}{n^2} \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2} - \frac{2}{n\rho} \right] \varphi(\rho) = -\frac{1}{2n^2} \varphi(\rho) \quad (391)$$

となり、 $n^2/2$ を両辺に掛けると、

$$\left[\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{d}{d\rho} - \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2} + \frac{n}{\rho} + \frac{1}{4} \right] \varphi(\rho) = 0 \quad (392)$$

となる。ここで、

$$\varphi(\rho) = \rho^\ell e^{-\rho/2} f(\rho) \quad (393)$$

とおけば、 f はラゲール陪多項式の微分方程式

$$\rho \frac{d^2 f}{d\rho^2} + (2\ell + 2 - \rho) \frac{df}{d\rho} + (n - \ell - 1)f = 0 \quad (394)$$

を満たす。これを、微分方程式(380)と比較すると、 $k \rightarrow 2\ell + 1$ および $n \rightarrow n + \ell$ であることが分かる。したがって、解は

$$f(\rho) = L_{n+\ell}^{2\ell+1}(\rho) \quad (395)$$

である。まとめて、

$$\varphi(\rho) = \rho^\ell e^{-\rho/2} L_{n+\ell}^{2\ell+1}(\rho) \quad (396)$$

となる。

7.6 ルジャンドル陪多項式

[定義]

ルジャンドル陪関数は、次のように定義される。

$$P_\ell^m(x) = \frac{1}{2^\ell \ell!} (1-x^2)^{m/2} \frac{d^{\ell+m}}{dx^{\ell+m}} (x^2-1)^\ell \quad (397)$$

ここで、 $(x^2-1)^\ell$ は 2ℓ 次の多項式なので、 m のとり得る範囲として意味のあるのは、

$$-\ell \leq m \leq \ell \quad (398)$$

である。まず、 x を $-x$ と置き換えると、 x 微分が $(\ell+m)$ 階なので、

$$P_\ell^m(-x) = (-1)^{\ell+m} P_\ell^m(x) \quad (399)$$

が成り立つ。また、 $m=0$ とすると、右辺は、ルジャンドル多項式のロドリグ公式となるから、

$$P_\ell^0(x) = P_\ell(x) \quad (400)$$

となり、 $m \geq 0$ ならば、

$$P_\ell^m(x) = (1-x^2)^{m/2} \frac{d^m}{dx^m} P_\ell(x) \quad (401)$$

となり、ルジャンドル多項式 $P_\ell(x)$ の微分から得られる。

ルジャンドル多項式を使うと、比較的小さな ℓ に対して、

$$\ell = 0 \quad : \quad P_0^0(x) = P_0(x) = 1 \quad (402)$$

$$\begin{aligned} \ell = 1 & : & P_1^0(x) &= P_1(x) = x \\ & : & P_1^1(x) &= \sqrt{1-x^2} \end{aligned} \quad (403)$$

$$\begin{aligned} \ell = 2 & : & P_2^0(x) &= P_2(x) = \frac{1}{2}(3x^2-1) \\ & : & P_2^1(x) &= 3x\sqrt{1-x^2} \\ & : & P_2^2(x) &= 3(1-x^2) \end{aligned} \quad (404)$$

などが得られる。

特に、 $m = -\ell$ のときには、

$$P_\ell^{-\ell}(x) = \frac{(-1)^\ell}{2^\ell \ell!} (1-x^2)^{\ell/2} \quad (405)$$

であり、 $m = \ell$ のときには、

$$P_\ell^\ell(x) = \frac{(2\ell)!}{2^\ell \ell!} (1-x^2)^{\ell/2} \quad (406)$$

となる。このふたつを比べると、両者は定数倍の因子を除いて同じ関数である。このような関係は一般の m について成り立つ。すなわち、

$$P_\ell^{-m}(x) = (-1)^m \frac{(\ell - m)!}{(\ell + m)!} P_\ell^m(x) \quad (407)$$

この対称性は、ルジャンドル陪関数の重要な性質である。この証明は、定義式 (397) をつかう。

$$(x^2 - 1)^\ell = (x + 1)^\ell (x - 1)^\ell \quad (408)$$

なので、ライプニッツの微分公式を使うと、

$$\frac{d^{\ell+m}}{dx^{\ell+m}} (x + 1)^\ell (x - 1)^\ell = \sum_r \ell_{+m} C_r \frac{d^{\ell+m-r}}{dx^{\ell+m-r}} (x + 1)^\ell \frac{d^r}{dx^r} (x - 1)^\ell \quad (409)$$

となり、これは

$$\begin{aligned} &= \sum_r \frac{(\ell + m)!}{r!(\ell + m - r)!} \frac{\ell!}{(r - m)!} (x + 1)^{r-m} \frac{\ell!}{(\ell - r)!} (x - 1)^{\ell-r} \\ &= (\ell + m)! \sum_r \ell C_{r-m} \ell C_r (x + 1)^{r-m} (x - 1)^{\ell-r} \end{aligned} \quad (410)$$

となる。 m を $-m$ とすると、同様にして、

$$\begin{aligned} &\frac{1}{(1 - x^2)^m} \frac{d^{\ell-m}}{dx^{\ell-m}} (x + 1)^\ell (x - 1)^\ell \\ &= \frac{(\ell - m)!}{(1 - x^2)^m} \sum_r \ell C_{r+m} \ell C_r (x + 1)^{r+m} (x - 1)^{\ell-r} \\ &= (-1)^m (\ell - m)! \sum_r \ell C_{r+m} \ell C_r (x + 1)^r (x - 1)^{\ell-r-m} \end{aligned} \quad (411)$$

ここで、 $r \rightarrow s - m$ と置き換えると、 $s \rightarrow m + r$ となるので、

$$\begin{aligned} &= (-1)^m (\ell - m)! \sum_s \ell C_s \ell C_{s-m} (x + 1)^{s-m} (x - 1)^{\ell-s} \\ &= (-1)^m \frac{(\ell - m)!}{(\ell + m)!} \frac{d^{\ell+m}}{dx^{\ell+m}} (x + 1)^\ell (x - 1)^\ell \end{aligned} \quad (412)$$

となるので、対称性の式 (407) は証明できた。

[ルジャンドル陪関数の漸化式]

漸化式は次のようになる。

$$\left[(1 - x^2) \frac{d}{dx} + mx \right] P_\ell^m(x) = \sqrt{1 - x^2} P_\ell^{m+1}(x) \quad (413)$$

$$\left[(1 - x^2) \frac{d}{dx} - mx \right] P_\ell^m(x) = -(\ell + m)(\ell - m + 1) \sqrt{1 - x^2} P_\ell^{m-1}(x) \quad (414)$$

ここで、大カッコの中の演算子は、 $P_\ell^m(x)$ の次数 m を上げたり、下げたりするはたらきをもつので、上昇演算子、下降演算子、あるいは併せて昇降演算子とよばれる。漸化式 (413) の証明は、定義式 (397) を使うと、

$$(1 - x^2) \frac{d}{dx} P_\ell^m(x)$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{2^\ell \ell!} (1-x^2)^{1+m/2} \frac{d^{\ell+m+1}}{dx^{\ell+m+1}} (x^2-1)^\ell \\
&\quad - mx \frac{1}{2^\ell \ell!} (1-x^2)^{m/2} \frac{d^{\ell+m}}{dx^{\ell+m}} (x^2-1)^\ell \\
&= \sqrt{1-x^2} P_\ell^m(x) - mx P_\ell^m(x) \tag{415}
\end{aligned}$$

となり、すぐに証明できた。漸化式 (414) は、漸化式 (413) で、 $m \rightarrow -m$ と置き換えて、

$$\left[(1-x^2) \frac{d}{dx} - mx \right] P_\ell^{-m}(x) = \sqrt{1-x^2} P_\ell^{-m+1}(x) \tag{416}$$

となる。これに対称性の式 (407) を代入すると、

$$\left[(1-x^2) \frac{d}{dx} - mx \right] (-1)^m \frac{(\ell-m)!}{(\ell+m)!} P_\ell^m(x) = (-1)^{-m+1} \frac{(\ell-m+1)!}{(\ell+m-1)!} \sqrt{1-x^2} P_\ell^{m-1}(x) \tag{417}$$

となり、まとめて

$$\left[(1-x^2) \frac{d}{dx} - mx \right] 1)^m P_\ell^m(x) = -\frac{(\ell+m)! (\ell-m+1)!}{(\ell-m)! (\ell+m-1)!} \sqrt{1-x^2} P_\ell^{m-1}(x) \tag{418}$$

となるので、漸化式 (414) が証明できた。

[ルジャンドル陪関数の微分方程式]

ルジャンドル陪関数の微分方程式は、

$$\left[(1-x^2) \frac{d^2}{dx^2} - 2x \frac{d}{dx} + \ell(\ell+1) - m^2 \frac{1-x^2+x^2}{1-x^2} \right] P_\ell^m(x) = 0 \tag{419}$$

で与えられる。

ルジャンドル陪関数の漸化式 (413) で、 $m \rightarrow m-1$ と置いて、漸化式 (414) を

$$-\frac{1}{(\ell+m)(\ell-m+1)} \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} \left[(1-x^2) \frac{d}{dx} - mx \right] P_\ell^m(x) = P_\ell^{m-1}(x) \tag{420}$$

と変形し、代入すると

$$\begin{aligned}
& - \left[(1-x^2) \frac{d}{dx} + (m-1)x \right] \frac{1}{(\ell+m)(\ell-m+1)} \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} \left[(1-x^2) \frac{d}{dx} - mx \right] P_\ell^m(x) \\
&= \sqrt{1-x^2} P_\ell^m(x) \tag{421}
\end{aligned}$$

が得られ、まとめると

$$\begin{aligned}
& \left[(1-x^2) \frac{d}{dx} + (m-1)x \right] \left[(1-x^2)^{1/2} \frac{d}{dx} - mx(1-x^2)^{-1/2} \right] P_\ell^m(x) \\
&+ (1-x^2)^{1/2} (\ell+m)(\ell-m+1) P_\ell^m(x) = 0 \tag{422}
\end{aligned}$$

各項をバラすと

$$\left[(1-x^2)^{3/2} \frac{d^2}{dx^2} - x(1-x^2)^{1/2} \frac{d}{dx} + (m-1)x(1-x^2)^{1/2} \frac{d}{dx} \right.$$

$$\begin{aligned}
& - m(1-x^2)^{1/2} - mx^2(1-x^2)^{-1/2} - mx(1-x^2)^{1/2} \frac{d}{dx} \\
& - m(m-1)x^2(1-x^2)^{-1/2} \\
& + (1-x^2)^{1/2}(\ell+m)(\ell-m+1) \Big] P_\ell^m(x) = 0 \tag{423}
\end{aligned}$$

となり、 $(1-x^2)^{1/2}$ で割り、まとめると

$$\begin{aligned}
& \left[(1-x^2) \frac{d^2}{dx^2} + (-x + (m-1)x - mx) \frac{d}{dx} - m - \frac{mx^2}{1-x^2} \right. \\
& \left. - \frac{m(m-1)x^2}{1-x^2} + \ell^2 - m^2 + \ell + m \right] P_\ell^m(x) = 0 \tag{424}
\end{aligned}$$

となるので、各項を整理して、

$$\left[(1-x^2) \frac{d^2}{dx^2} - 2x \frac{d}{dx} + \ell(\ell+1) - m^2 \frac{1-x^2+x^2}{1-x^2} \right] P_\ell^m(x) = 0 \tag{425}$$

となるので、ルジャンドル陪関数の微分方程式 (419) を証明できた。また、この微分方程式は、

$$\frac{d}{dx} \left[(1-x^2) \frac{dP_\ell^m(x)}{dx} \right] + \left[\ell(\ell+1) - \frac{m^2}{1-x^2} \right] P_\ell^m(x) = 0 \tag{426}$$

とも書ける。

ここで、

$$x = \cos \theta \tag{427}$$

とおけば、

$$\frac{d}{dx} = -\frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} \tag{428}$$

なので、微分方程式 (426) は、

$$\left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} \sin \theta \frac{d}{d\theta} + \ell(\ell+1) - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} \right] P_\ell^m(\cos \theta) = 0 \tag{429}$$

となる。この形の微分方程式は、球座標で変数分離したときによくあらわれる。

[ルジャンドル陪関数の直交性]

ルジャンドル陪関数の直交性は、

$$\int_{-1}^1 P_\ell^m(x) P_{\ell'}^m(x) dx = \frac{2}{2\ell+1} \frac{(\ell+m)!}{(\ell-m)!} \delta_{\ell\ell'} \tag{430}$$

と表すことができる。この証明は、まず、

$$I_m = \int_{-1}^1 P_\ell^{-m}(x) P_{\ell'}^m(x) dx \tag{431}$$

と置くと、ルジャンドル陪関数の定義式 (397) を代入して、

$$I_m = \int_{-1}^1 P_\ell^{-m}(x) P_{\ell'}^m(x) dx$$

$$\begin{aligned}
&= \int_{-1}^1 \frac{1}{2^\ell \ell!} \frac{1}{2^{\ell'} \ell'!} \frac{d^{\ell-m}}{dx^{\ell-m}} (x^2-1)^\ell \frac{d^{\ell+m}}{dx^{\ell+m}} (x^2-1)^{\ell'} dx \\
&= - \int_{-1}^1 \frac{1}{2^\ell \ell!} \frac{1}{2^{\ell'} \ell'!} \frac{d^{\ell-m+1}}{dx^{\ell-m+1}} (x^2-1)^\ell \frac{d^{\ell+m-1}}{dx^{\ell+m-1}} (x^2-1)^{\ell'} dx \\
&= -I_{m-1} \tag{432}
\end{aligned}$$

となる。ここで、部分積分を用いた。また、端点 $x = \pm 1.0$ において $(x^2-1)^\ell$ の $\ell+m-1$ 階微分がゼロになることを用い、

$$\left[\frac{d^{\ell+m-1}}{dx^{\ell+m-1}} (x^2-1)^{\ell'} \right]_{-1}^{-1} = 0 \tag{433}$$

となることを使った。したがって、

$$\begin{aligned}
I_m &= -I_{m-1} = (-1)^m I_0 = (-1)^m \frac{2}{2\ell+1} \delta_{\ell\ell'} \\
&= (-1)^m \frac{(\ell-m)!}{(\ell+m)!} \int_{-1}^1 P_\ell^m(x) P_{\ell'}^m(x) dx \tag{434}
\end{aligned}$$

となる。ここで、ルジャンドル多項式の直交性を使い、 I_0 を評価した。また、対称性の式 (407) を使い、最後の式を評価した。これで、ルジャンドル陪関数の直交性 (430) は証明できた。

7.7 球面調和関数

[定義]

球面調和関数 $Y_{\ell m}(\theta, \phi)$ は、ルジャンドル陪関数と指数関数を用いて、

$$Y_{\ell m}(\theta, \phi) = (-1)^m \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi} \frac{(\ell-m)!}{(\ell+m)!}} P_{\ell}^m(\cos\theta) e^{im\phi} \quad (435)$$

と定義される。ここで、 θ 、 ϕ は球座標での天頂角と方位角であり、

$$0 \leq \theta \leq \pi, \quad 0 \leq \phi \leq 2\pi \quad (436)$$

である。添字の ℓ と m は整数で

$$-\ell \leq m \leq \ell, \quad \ell = 0, 1, 2, \dots \quad (437)$$

に限られる。

具体的な形は、

$$\ell = 0 : \quad Y_{00} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \quad (438)$$

$$\begin{aligned} \ell = 1 : \quad Y_{11} &= -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin\theta e^{i\phi} \\ Y_{10} &= \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos\theta \\ Y_{1,-1} &= -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin\theta e^{-i\phi} \end{aligned} \quad (439)$$

$$\begin{aligned} \ell = 2 : \quad Y_{22} &= \sqrt{\frac{5}{96\pi}} 3 \sin^2\theta e^{2i\phi} \\ \ell = 2 : \quad Y_{21} &= -\sqrt{\frac{5}{24\pi}} 3 \sin\theta \cos\theta e^{i\phi} \\ Y_{20} &= \sqrt{\frac{5}{4\pi}} \frac{1}{2} (3 \cos^2\theta - 1) \\ \ell = 2 : \quad Y_{2,-1} &= -\sqrt{\frac{5}{24\pi}} 3 \sin\theta \cos\theta e^{-i\phi} \\ \ell = 2 : \quad Y_{22} &= \sqrt{\frac{5}{96\pi}} 3 \sin^2\theta e^{2i\phi} \end{aligned} \quad (440)$$

となる。

また、 m と $-m$ の間には、複素共役な関係、

$$Y_{\ell, -m}(\theta, \phi) = (-1)^m Y_{\ell m}(\theta, \phi)^* \quad (441)$$

が成り立つ。また、 (θ, ϕ) の向きを反転させると、

$$\theta \rightarrow \pi - \theta, \quad \phi \rightarrow \phi + \pi \quad (442)$$

とすればよい。このとき、

$$Y_{\ell,m}(\pi - \theta, \phi + \pi) = (-1)^\ell Y_{\ell,m}(\theta, \phi) \quad (443)$$

となる。また、ルジャンドル陪関数の直交性を使うと、

$$\int_0^\phi \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} d\phi Y_{\ell m}(\theta, \phi) Y_{\ell' m'}(\theta, \phi) = \delta_{\ell \ell'} \delta_{m m'} \quad (444)$$

という球面調和関数に関する直交性が得られる。

[球面調和関数の漸化式]

漸化式は次のようになる。

$$e^{i\phi} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right) Y_{\ell m} = \sqrt{(\ell - m)(\ell + m + 1)} Y_{\ell, m+1} \quad (445)$$

$$e^{i\phi} \left(-\frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right) Y_{\ell m} = \sqrt{(\ell - m)(\ell - m + 1)} Y_{\ell, m-1} \quad (446)$$

ここで、それぞれ $Y_{\ell m}$ の次数 m を上げたり、下げたりするはたらきをもつので、上昇演算子、下降演算子、あるいは併せて昇降演算子とよばれる。これらの漸化式はルジャンドルの陪関数の漸化式から導かれる。

[球面調和関数の微分方程式]

球面調和関数の微分方程式は、

$$\left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \ell(\ell + 1) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial}{\partial \phi^2} \right] Y_{\ell m}(\theta, \phi) = 0 \quad (447)$$

となる。この形の微分方程式は、球座標で変数分離したときによくあらわれる。

このような微分方程式の一般解は、

$$f(\theta, \phi) = \sum_{-\ell}^{\ell} A_{\ell m} Y_{\ell m}(\theta, \phi) \quad (448)$$

であり、展開係数は、

$$A_{\ell m} = \int_0^\pi \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} d\phi Y_{\ell m}(\theta, \phi) Y_{\ell m}^*(\theta, \phi) f(\theta, \phi) \quad (449)$$

となる。

[球面調和関数の加法定理]

角度 (θ_1, ϕ_1) および角度 (θ_2, ϕ_2) で指定される単位ベクトル \mathbf{r}_1 、 \mathbf{r}_2 は直交座標で、

$$\mathbf{r}_1 = (\sin \theta_1 \cos \phi_1, \sin \theta_1 \sin \phi_1, \cos \theta_1) \quad (450)$$

$$\mathbf{r}_2 = (\sin \theta_2 \cos \phi_2, \sin \theta_2 \sin \phi_2, \cos \theta_2) \quad (451)$$

と表される。このふたつのベクトルのなす角を γ とすると、

$$\cos \gamma = \mathbf{r}_1 \cdot \mathbf{r}_2$$

$$= \cos \theta_1 \cos \theta_2 + \sin \theta_1 \sin \theta_2 \cos(\phi_1 - \phi_2) \quad (452)$$

である。このとき加法定理

$$P_\ell(\cos \gamma) = \frac{4\pi}{2\ell + 1} \sum_{- \ell}^{\ell} Y_{\ell m}(\theta_1, \phi_1) Y_{\ell m}(\theta_2, \phi_2)^* \quad (453)$$

が成り立つ。共役の*はどちらの球面調和関数につけてもよい。ルジャンドルの陪関数を使うと、

$$\begin{aligned} P_\ell(\cos \gamma) &= P_\ell(\cos \theta_1) P_\ell(\cos \theta_2) \\ &+ 2 \sum_{m=1}^{\ell} \frac{(\ell - m)!}{(\ell + m)!} P_\ell^m(\cos \theta_1) P_\ell^m(\cos \theta_2) \cos(\phi_1 - \phi_2) \end{aligned} \quad (454)$$

となる。

この加法定理の証明は、球面調和関数の一般解の展開式(448)をつかう。つまり、 (θ_1, ϕ_1) および (θ_2, ϕ_2) のどちらか引数に関しても、微分方程式(447)を満たす。したがって、 (θ_1, ϕ_1) に関して展開すると、

$$P_\ell(\cos \gamma) = \sum_{- \ell}^{\ell} A_{\ell m} Y_{\ell m}(\theta_1, \phi_1) \quad (455)$$

となる。展開係数は、

$$A_{\ell m} = \int_0^\pi \sin \theta_1 d\theta_1 \int_0^{2\pi} d\phi_1 Y_{\ell m}(\theta_1, \phi_1)^* P_\ell(\cos \gamma) \quad (456)$$

となる。この積分は、球面全体にわたって行われるので、積分にあたってz軸をどの方向にとってもかまわない。ここでは、新しくz軸を (θ_2, ϕ_2) 方向にとる。この新しいz軸からの角度を (γ, ψ) と置くと、

$$Y_{\ell m}(\theta_1, \phi_1)^* = \sum_{m'} a_{\ell m'} Y_{\ell m'}(\gamma, \psi) \quad (457)$$

と展開できる。ここで、係数 $a_{\ell m'}$ は \mathbf{r}_1 に依存せず、 \mathbf{r}_2 だけで決まる量である。特別に、 \mathbf{r}_1 が \mathbf{r}_2 に一致する場合を考えると、 $\gamma = 0$ であり、定義(435)より、

$$\begin{aligned} Y_{\ell m'} &= 0 \quad (m' \neq 0 \text{ のとき}) \\ Y_{\ell 0} &= \sqrt{\frac{2\ell + 1}{4\pi}} \end{aligned} \quad (458)$$

であるので、 $m' = 0$ の係数 $a_{\ell 0}$ だけは、

$$a_{\ell 0} = \sqrt{\frac{4\pi}{2\ell + 1}} Y_{\ell 0}(\theta_2, \phi_2)^* \quad (459)$$

である。

さて、式 (457) を式 (456) に代入して、 (θ_1, ϕ_1) に関する積分を (γ, ψ) に置き換えると、

$$\begin{aligned}
A_{\ell m} &= \int_0^\pi \sin \theta_1 d\theta_1 \int_0^{2\pi} d\phi_1 Y_{\ell m}(\theta_1, \phi_1)^* P_\ell(\cos \gamma) \\
&= \int_0^\pi \sin \gamma d\gamma \int_0^{2\pi} d\psi \sum_{m'} a_{\ell m'} Y_{\ell m'}(\gamma, \psi) P_\ell(\cos \gamma) \\
&= a_{\ell 0} \int_0^\pi \sin \gamma d\gamma \int_0^{2\pi} d\psi Y_{\ell 0}(\gamma, \psi) P_\ell(\cos \gamma) \\
&= a_{\ell 0} \int_0^\pi \sin \gamma d\gamma \int_0^{2\pi} d\psi \sqrt{\frac{4\pi}{2\ell+1}} Y_{\ell 0}(\cos \gamma) Y_{\ell 0}(\cos \gamma) \\
&= a_{\ell 0} \sqrt{\frac{4\pi}{2\ell+1}} \\
&= \sqrt{\frac{4\pi}{2\ell+1}} \sqrt{\frac{4\pi}{2\ell+1}} Y_{\ell m}(\theta_2, \phi_2)^* \\
&= \frac{4\pi}{2\ell+1} Y_{\ell m}(\theta_2, \phi_2)^* \tag{460}
\end{aligned}$$

となる。ここで、直交性の式 (444) を使った。これを式 (455) に代入すると、加法定理 (453) が得られる。

7.8 水素原子模型

[クーロン・ポテンシャル]

電荷 e をもつ陽子と $-e$ をもつ電子の間の相互作用の静電ポテンシャルは、

$$V(r) = -\frac{e^2}{r} \quad (461)$$

となる。陽子と電子の運動量をそれぞれ、 \mathbf{p}_1 および \mathbf{p}_2 とし、質量を m_1 および m_2 とすると、ハミルトニアンは、

$$\frac{p_1^2}{2m_1} + \frac{p_2^2}{2m_2} - \frac{e^2}{r} \quad (462)$$

とかける。重心の運動と二粒子の相対運動を分離すると、二粒子の相対運動は

$$\frac{p^2}{2m} - \frac{e^2}{r} \quad (463)$$

となる。ここで、 m は換算質量

$$m = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \quad (464)$$

である。これを基にして、シュレーディンガー方程式を作ると、

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta - \frac{e^2}{r} \right] \phi(\mathbf{r}) = E\phi(\mathbf{r}) \quad (465)$$

となる。簡単化のために、

$$m = \hbar = e = 1 \quad (466)$$

の単位系を採用し、球座標であらわすと、

$$\begin{aligned} & \left[-\frac{1}{2} \left\{ \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right\} - \frac{1}{r} \right] \phi(\mathbf{r}) \\ & = E\phi(\mathbf{r}) \end{aligned} \quad (467)$$

となる。動径成分 $\Psi(r)$ と角度成分 $Y_{\ell m}(\theta, \phi)$ に変数分離したときに

$$\left[-\frac{1}{2} \left\{ \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} - \frac{m^2}{r^2} \right\} - \frac{1}{r} \right] \Psi(r) = E\Psi(r) \quad (468)$$

および

$$\left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} + \ell(\ell+1) \right] Y_{\ell m}(\theta, \phi) = 0 \quad (469)$$

と分離される。動径部分の微分方程式からラゲール倍多項式に対応するものが、角度成分からは、球関数に対応するものが出て来る。