

Abstract

本テキストは特殊函数と量子力学の繋がりを説明する．量子力学の究極的な目標は，系の状態ベクトルを把握することである．量子力学の基本的な要請により，系の状態ベクトル $|\psi\rangle$ は，

$$\hat{H} |\psi\rangle = E |\psi\rangle \quad (0.0.1)$$

なる固有方程式に帰着する．状態ベクトルは，考えている系の情報を全て含むものであり， $|\psi\rangle$ と系の状態が 1 対 1 対応する．例えば，電子はスピンと呼ばれる物理量を持ち，スピンは上向きか下向きの 2 種類しか存在しないことが Stern-Gerlach の実験により知られている．Stern-Gerlach の実験のセットアップでは，電子の状態ベクトルは上向きスピンと下向きスピンの 2 つの基底で

Chapter 1

特殊函数

本章では数ある特殊函数のうち, Strum-Liouville 演算子と呼ばれるクラスの演算子の固有函数を扱う. この演算子のクラスは極めて性質が良いことが知られている.

1.1 Hermite 演算子

定義 1.1: Hermite 演算子

内積が定義されている函数空間 V の任意の元 f, g に対して,

$$\langle f, \mathcal{L}g \rangle = \langle \mathcal{L}f, g \rangle \quad (1.1.1)$$

なる演算子 \mathcal{L} を Hermite 演算子という.

1.2 Strum-Liouville 演算子

定義 1.2: Strum-Liouville 演算子

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

$$\langle f, g \rangle := \int_a^b f^*(x)g(x)\rho(x) dx \quad (1.2.1)$$

なる内積を入れる. 函数空間 V 上の演算子として \mathcal{L} を,

$$\mathcal{L} := \frac{1}{\rho(x)} \left[\frac{d}{dx} \left\{ p(x) \frac{d}{dx} \right\} + q(x) \right] \quad (1.2.2)$$

とする. 式 (1.2.2) なる形をした演算子を Strum-Liouville 演算子という.

命題 1.1: Strum-Liouville 演算子の Hermite 性

境界条件を, $\forall f \in V$ について,

$$\begin{cases} f(a) = f(b) \\ p(a)f'(a) = p(b)f'(b) \end{cases} \quad (1.2.3)$$

とすると,

$$\langle f, \mathcal{L}g \rangle = \langle \mathcal{L}f, g \rangle \quad (1.2.4)$$

が成立する.

Proof. 内積の定義より,

$$\langle f, \mathcal{L}g \rangle = \int_a^b f^*(x) \frac{1}{\rho(x)} \left[\frac{d}{dx} \left\{ p(x) \frac{d}{dx} g(x) \right\} + q(x)g(x) \right] \rho(x) dx \quad (1.2.5)$$

$$= \int_a^b f^*(x) \left[\frac{d}{dx} \left\{ p(x) \frac{d}{dx} g(x) \right\} + q(x)g(x) \right] dx \quad (1.2.6)$$

$$= [f^*(x)g'(x)]_a^b - \int_a^b f'^*(x)p(x)g'(x) dx + \int_a^b f^*(x)q(x)g(x) dx \quad (1.2.7)$$

$$= [f^*(x)p(x)g'(x)]_a^b - [f'^*(x)p(x)g(x)]_a^b + \int_a^b g(x) \frac{1}{\rho(x)} \left[\frac{d}{dx} \left(p(x) \frac{d}{dx} f^*(x) \right) + q(x)f^*(x) \right] \rho(x) dx \quad (1.2.8)$$

$$= [f^*(x)p(x)g'(x)]_a^b - [f'^*(x)p(x)g(x)]_a^b + \langle g, \mathcal{L}f \rangle^* \quad (1.2.9)$$

$$= [f^*(x)p(x)g'(x)]_a^b - [g(x)p(x)f'^*(x)]_a^b + \langle \mathcal{L}f, g \rangle \quad (1.2.10)$$

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

$$[f^*(x)p(x)g'(x)]_a^b - [f'^*(x)p(x)g(x)]_a^b = \{p(b)g'(b) - p(a)f(a)\}f^*(a) - \{g(b) - g(a)\}p(a)f'(a) \quad (1.2.11)$$

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

$$\langle f, \mathcal{L}g \rangle = \langle \mathcal{L}f, g \rangle \quad (1.2.12)$$

を得る. □

1.3 Hermite 多項式

1.4 Legendre 多項式

定義 1.3: \mathcal{L}_m の定義

演算子 \mathcal{L}_m を,

$$\mathcal{L}_m := \frac{d}{dx} \left\{ (1-x^2) \frac{d}{dx} \right\} - \frac{m^2}{1-x^2} \quad (1.4.1)$$

と定義する. ただし, $m \in \{0, 1, \dots\}$ である. 境界条件は,

$$p(\pm 1)f^*(\pm 1)g'(\pm 1) = 0 \quad (1.4.2)$$

とする.

注意 1.1

\mathcal{L}_m は式 (1.2.2) において,

$$a = -b = 1 \quad (1.4.3)$$

$$\rho(x) = 1 \quad (1.4.4)$$

$$p(x) = 1 - x^2 \quad (1.4.5)$$

$$q(x) = -\frac{m^2}{1-x^2} \quad (1.4.6)$$

としたものであるから,

$$\mathcal{L}_m = \frac{d}{dx} \left\{ (1-x^2) \frac{d}{dx} \right\} - \frac{m^2}{1-x^2} \quad (1.4.7)$$

となる. 内積は,

$$\langle f, g \rangle = \int_{-1}^1 f^*(x)g(x) dx \quad (1.4.8)$$

となる.

命題 1.2: \mathcal{L}_m の Hermite 性

演算子 \mathcal{L}_m は Hermite 演算子である.

Proof. たとえば, $g'(x) = p(x)$ となるように $g(x)$ を定めれば, $f(1) = f(-1) = 0$ となる. また, $f(x) = 1$ となるように $f(x)$ を定めれば, $p(1)g'(1) = p(-1)g'(1) = 0$ となるので, 前節で示した境界条件を満足する. \square

さて, Legendre 多項式 $P_n(x)$ は n を非負整数として,

$$\mathcal{L}_0 P_n(x) = -n(n+1)P_n(x) \quad (1.4.9)$$

$$\Leftrightarrow \frac{d}{dx} \left\{ (1-x^2) \frac{d}{dx} P_n(x) \right\} = -n(n+1)P_n(x) \quad (1.4.10)$$

なる $P_n(x)$ のうち, $x=0$ 周りで級数展開したもので,

$$P_n(x) = \sum_{j=0}^{\infty} u_j x^j \quad (1.4.11)$$

と書いたとき,

$$u_n = \frac{(2n)!}{2^n (n!)^2} \quad (1.4.12)$$

$$u_{n+1} = 0 \quad (1.4.13)$$

なるものである. 式 (1.4.11) を式 (1.4.10) に代入すると,

$$\frac{d}{dx} \left\{ (1-x^2) \frac{d}{dx} \sum_{j=0}^{\infty} u_j x^j \right\} = -n(n+1) \sum_{j=0}^{\infty} u_j x^j \quad (1.4.14)$$

$$\Leftrightarrow \sum_{j=0}^{\infty} j u_j \frac{d}{dx} (x^{j-1} - x^{j+1}) = -n(n+1) \sum_{j=0}^{\infty} u_j x^j \quad (1.4.15)$$

$$\Leftrightarrow \sum_{j=0}^{\infty} j(j-1) u_j x^{j-2} - \sum_{j=0}^{\infty} j(j+1) u_j x^j = -n(n+1) \sum_{j=0}^{\infty} u_j x^j \quad (1.4.16)$$

$$\Leftrightarrow \sum_{j=0}^{\infty} j(j-1) u_j x^{j-2} = \sum_{j=0}^{\infty} u_j [j(j+1) - n(n+1)] x^j \quad (1.4.17)$$

$$\Leftrightarrow \sum_{j=2}^{\infty} j(j-1) u_j x^{j-2} = \sum_{j=0}^{\infty} u_j [j(j+1) - n(n+1)] x^j \quad (1.4.18)$$

$$\Leftrightarrow \sum_{j=0}^{\infty} (j+1)(j+2)u_{j+2}x^j = \sum_{j=0}^{\infty} u_j[j(j+1) - n(n+1)]x^j \quad (1.4.19)$$

となるから,

$$(j+1)(j+2)u_{j+2} = [j(j+1) - n(n+1)]u_j \quad (1.4.20)$$

なる漸化式が成立する. 式 (1.4.20) において $j = n$ を代入すると, $u_{n+2} = 0$ となる. また, $j = n+1$ を代入すると式 (1.4.13) より $u_{n+1} = 0$ である. よって,

$$0 = u_{n+1} = u_{n+2} = u_{n+3} = u_{n+4} = \cdots \quad (1.4.21)$$

となる. また, 式 (1.4.20) に $j = n-2$ を代入すると,

$$u_{n-2} = -\frac{n(n-1)}{2(2n-1)}u_n \quad (1.4.22)$$

となる. よって, 式 (1.4.12) と式 (1.4.22) を用いて式 (1.4.11) を表すと,

$$P_n(x) = \frac{(2n)!}{2^n(n!)^2} \left[x^n - \frac{n(n-1)}{2(2n-1)}x^{n-2} + \frac{n(n-1)(n-2)(n-3)}{2 \cdot 4 \cdot (2n-1)(2n-3)}x^{n-4} + \cdots \right] \quad (1.4.23)$$

$$= \sum_{s=0}^{\lfloor n/2 \rfloor} (-1)^s \frac{(2n-2s)!}{2^n s!(n-s)!(n-2s)!} x^{n-2s} \quad (1.4.24)$$

となる.

命題 1.3: Rodrigues の公式

Legendre 多項式 $P_n(x)$ は,

$$P_n(x) = \frac{1}{2^n n!} \frac{d^n}{dx^n} (x^2 - 1)^n \quad (1.4.25)$$

とも書ける.

Proof.

$$\frac{d^n}{dx^n} (x^2 - 1)^n = \sum_{s=0}^n \frac{d^n}{dx^n} (-1)^s \binom{n}{s} x^{2n-2s} \quad (1.4.26)$$

$$= \sum_{s=0}^{\lfloor n/2 \rfloor} (-1)^s \frac{n!}{s!(n-s)!} \frac{(2n-2s)!}{(n-2s)!} \quad (1.4.27)$$

なる関係を用いると, WIP □

1.5 Legendre 陪多項式

定義 1.4: Legendre 陪多項式

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

$$P_n^m(x) := (1-x^2)^{m/2} \frac{d^m}{dx^m} P_n(x) \quad (1.5.1)$$

と定義される.

注意 1.2

式 (1.4.25) を用いれば,

$$P_n^m(x) = (1-x^2)^{m/2} \frac{d^m}{dx^m} P_n(x) \quad (1.5.2)$$

$$= (1-x^2)^{m/2} \frac{d^m}{dx^m} \frac{1}{2^n n!} \frac{d^n}{dx^n} (x^2-1)^n \quad (1.5.3)$$

$$= \frac{1}{2^n n!} (1-x^2)^{m/2} \frac{d^{n+m}}{dx^{n+m}} (x^2-1)^n \quad (1.5.4)$$

と書ける.

命題 1.4: Legendre の陪微分方程式

P_n^m は Legendre の陪微分方程式,

$$\mathcal{L}_m P_n^m(x) + n(n+1)P_n^m(x) = 0 \quad (1.5.5)$$

を満たす.

WIP

Legendre 多項式の直交性とノルムを調べる. Legendre 陪多項式の直交性は \mathcal{L}_m が Hermite 演算子であり, その固有函数である $P_n^m(x)$ が直交することより従う. 自分自身との内積, つまり, $\langle P_n^m(x), P_n^m(x) \rangle$ の値を計算する. 式 (1.5.4) を用いて, 式 (1.4.8) で示した内積の定義に従って計算する. $n+m$ 回部分積分を行うと,

$$\langle P_n^m(x), P_n^m(x) \rangle = \int_{-1}^1 \frac{1}{2^{2n}(n!)^2} (1-x^2)^m \left\{ \frac{d^{n+m}}{dx^{n+m}} (x^2-1)^m \right\} \left\{ \frac{d^{n+m}}{dx^{n+m}} (x^2-1)^m \right\} dx \quad (1.5.6)$$

$$= \frac{1}{2^{2n}(n!)^2} \int_{-1}^1 (1-x^2)^m \left\{ \frac{d^{n+m}}{dx^{n+m}} (x^2-1)^m \right\} \frac{d}{dx} \left\{ \frac{d^{n+m-1}}{dx^{n+m-1}} (x^2-1)^m \right\} dx \quad (1.5.7)$$

$$= \frac{1}{2^{2n}(n!)^2} \left[(1-x^2)^m \left\{ \frac{d^{n+m}}{dx^{n+m}} (x^2-1)^m \right\} \left\{ \frac{d^{n+m-1}}{dx^{n+m-1}} (x^2-1)^m \right\} \right]_{-1}^1 \quad (1.5.8)$$

$$- \frac{1}{2^{2n}(n!)^2} \int_{-1}^1 \left\{ \frac{d}{dx} (1-x^2)^m \left\{ \frac{d^{n+m}}{dx^{n+m}} (x^2-1)^m \right\} \right\} \left\{ \frac{d^{n+m-1}}{dx^{n+m-1}} (x^2-1)^m \right\} dx \quad (1.5.9)$$

$$= -\frac{1}{2^{2n}(n!)^2} \int_{-1}^1 \left\{ \frac{d}{dx} (1-x^2)^m \left\{ \frac{d^{n+m}}{dx^{n+m}} (x^2-1)^m \right\} \right\} \left\{ \frac{d^{n+m-1}}{dx^{n+m-1}} (x^2-1)^m \right\} dx \quad (1.5.10)$$

$$= \dots \quad (1.5.11)$$

$$= \frac{(-1)^{n+m}}{2^{2n}(n!)^2} \int_{-1}^1 (x^2-1)^n \left\{ \frac{d^{n+m}}{dx^{n+m}} (1-x^2)^m \left\{ \frac{d^{n+m}}{dx^{n+m}} (x^2-1)^n \right\} \right\} dx \quad (1.5.12)$$

$$= \frac{(-1)^{n+m}}{2^{2n}(n!)^2} \int_{-1}^1 (x^2-1)^n \left[\sum_{k=0}^{n+m} \binom{n+m}{k} \left\{ \frac{d^{n+m-k}}{dx^{n+m-k}} (1-x^2)^m \right\} \left\{ \frac{d^{n+m+k}}{dx^{n+m+k}} (x^2-1)^n \right\} \right] dx \quad (1.5.13)$$

となる. 最終行で Leibniz の公式を用いた. 式 (1.5.13) の和の中の $n+m-k$ 階微分と $n+m+k$ 階微分を考える. $(1-x^2)^m$ と $(x^2-1)^n$ の最高次数は, それぞれ $2m$ と $2n$ であるから, $2m \geq n+m-k$ かつ $2n \geq n+m+k$ なる k でのみ和の中は 0 でなくなる. つまり, $n-m \leq k$ かつ $n-m \geq k$ なる k は $k = n-m$ のみである. よって, 式 (1.5.13) は,

$$\langle P_n^m(x), P_n^m(x) \rangle = \frac{(-1)^{n+m}}{2^{2n}(n!)^2} \int_{-1}^1 (x^2-1)^n \left[\sum_{k=0}^{n+m} \binom{n+m}{k} \left\{ \frac{d^{n+m-k}}{dx^{n+m-k}} (1-x^2)^m \right\} \left\{ \frac{d^{n+m+k}}{dx^{n+m+k}} (x^2-1)^n \right\} \right] dx \quad (1.5.14)$$

$$= \frac{(-1)^{n+m}}{2^{2n}(n!)^2} \int_{-1}^1 (x^2 - 1)^n \left[\binom{n+m}{n-m} \left\{ \frac{d^{2m}}{dx^{2m}} (1-x^2)^m \right\} \left\{ \frac{d^{2n}}{dx^{2n}} (x^2 - 1)^n \right\} \right] dx \quad (1.5.15)$$

$$= \frac{(-1)^{n+m}}{2^{2n}(n!)^2} (-1)^m (2m)!(2n)! \frac{(n+m)!}{(n-m)!(2m)!} \int_{-1}^1 (x^2 - 1)^n dx \quad (1.5.16)$$

積分は、 $x = \cos \theta$ と置換すると、

$$\int_{-1}^1 (x^2 - 1)^n dx = (-1)^n n \int_{-1}^1 \sin^{2n+1} \theta d\theta \quad (1.5.17)$$

となる。 I_{2n+1} を、

$$I_{2n+1} := \int_0^\pi \sin^{2n+1} \theta d\theta \quad (1.5.18)$$

と定義すると、

$$I_{2n+1} = \int_0^\pi \sin^{2n} \theta \frac{d}{d\theta} (-\cos \theta) d\theta \quad (1.5.19)$$

$$= [\sin^{2n} \theta \cdot (-\cos \theta)]_0^\pi + 2n \int_0^\pi \sin^{2n-1} \theta \cos^2 \theta d\theta \quad (1.5.20)$$

$$= 2n I_{2n-1} - 2n I_{2n+1} \quad (1.5.21)$$

となるので、

$$I_{2n+1} = \frac{2n}{2n+1} I_{2n-1} \quad (1.5.22)$$

$$= \frac{2n}{2n+1} \frac{2n-2}{2n-1} I_{2n-3} \quad (1.5.23)$$

$$= \dots \quad (1.5.24)$$

$$= \frac{(2n)!!}{(2n+1)!!} I_1 \quad (1.5.25)$$

$$= 2 \frac{(2n)!!}{(2n+1)!!} \quad (1.5.26)$$

$$= 2 \cdot 2^n n! \cdot \frac{2^n n!}{(2n+1)!} \quad (1.5.27)$$

となる。2重階乗について、

$$(2n)!! = 2^n n! \quad (1.5.28)$$

$$(2n+1)!! = \frac{(2n+1)!}{(2n)!!} = \frac{(2n+1)!}{2^n n!} \quad (1.5.29)$$

なる関係が成り立つことを用いると、

$$\langle P_n^m(x), P_n^m(x) \rangle = \frac{(-1)^{n+m}}{2^{2n}(n!)^2} (-1)^m (2m)!(2n)! \frac{(n+m)!}{(n-m)!(2m)!} (-1)^n 2 \frac{(2n)!!}{(2n+1)!!} \quad (1.5.30)$$

$$= \frac{(-1)^{n+m}}{2^{2n}(n!)^2} (-1)^m (2m)!(2n)! \frac{(n+m)!}{(n-m)!(2m)!} (-1)^n 2 \cdot 2^n n! \cdot \frac{2^n n!}{(2n+1)!} \quad (1.5.31)$$

$$= \frac{2}{2n+1} \frac{(n+m)!}{(n-m)!} \quad (1.5.32)$$

となる。Legendre 多項式の直交性とまとめて書くと、

$$\langle P_{n'}^m(x), P_n^m(x) \rangle = \delta_n^{n'} \frac{2}{2n+1} \frac{(n+m)!}{(n-m)!} \quad (1.5.33)$$

となる。

1.6 Bessel 函数

定義 1.5: \mathcal{L}_ν の定義

函数空間は, $[0, a]$ で C^1 級の複素函数全体であるとする. \mathcal{L}_ν を,

$$\mathcal{L}_\nu := \frac{1}{z} \left[\frac{d}{dz} \left\{ z \frac{d}{dz} \right\} - \frac{\nu^2}{z} \right] \quad (1.6.1)$$

と定義する.

注意 1.3

\mathcal{L}_ν は式 (1.2.2) において, また,

$$a \rightarrow 0 \quad (1.6.2)$$

$$b \rightarrow a \quad (1.6.3)$$

$$\rho(z) = x \quad (1.6.4)$$

$$p(z) = x \quad (1.6.5)$$

$$q(z) = -\frac{\nu^2}{z}, \quad \nu \geq 0 \quad (1.6.6)$$

としたものである. すなわち,

$$\langle f, g \rangle = \int_0^a f^*(z) g(z) x \, dz \quad (1.6.7)$$

である.

さて,

$$\mathcal{L}_\nu J_\nu(z) = -J_\nu(z) \quad (1.6.8)$$

$$\Leftrightarrow \left(\frac{d^2}{dz^2} + \frac{1}{z} \frac{d}{dz} - \frac{\nu^2}{z^2} \right) J_\nu(z) = -J_\nu(z) \quad (1.6.9)$$

$$\Leftrightarrow \frac{d^2}{dz^2} J_\nu(z) + \frac{1}{z} \frac{d}{dz} J_\nu(z) - \frac{\nu^2}{z^2} J_\nu(z) = -J_\nu(z) \quad (1.6.10)$$

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

$$J_\nu(z) = z^\alpha \sum_n u_n z^n \quad (1.6.11)$$

となる. ただし, 計算の簡単のために $n < 0$ なる任意の n に対して $u_n = 0$ と定めた. また, $u_0 \neq 0$ とする. 式 (1.6.11) を式 (1.6.10) に代入することを考える. $J_\nu(z)$ の 1 階微分と 2 階微分が,

$$\frac{d}{dz} J_\nu(z) = \sum_n (n + \alpha) u_n z^{n+\alpha-1} \quad (1.6.12)$$

$$\frac{d^2}{dz^2} J_\nu(z) = \sum_n (n + \alpha)(n + \alpha - 1) u_n z^{n+\alpha-2} \quad (1.6.13)$$

と書けることを用いると,

$$\sum_n [(n + \alpha)(n + \alpha - 1) + (n + \alpha) - \nu^2] u_n z^{n+\alpha-2} = - \sum_n u_n z^{n+\alpha} \quad (1.6.14)$$

$$\Leftrightarrow \sum_n [(n + \alpha)(n + \alpha - 1) + (n + \alpha) - \nu^2] u_n z^{n+\alpha-2} = - \sum_n u_{n-2} z^{n+\alpha-2} \quad (1.6.15)$$

となる．係数を比較すると，

$$[(n + \alpha)^2 - \nu^2]u_n = -u_{n-2} \quad (1.6.16)$$

となる．式 (1.6.16) に $n = 1$ を代入すると $u_{-1} = 0$ より，

$$0 = u_1 = u_3 = \cdots \quad (1.6.17)$$

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

$$(0 + \alpha)^2 - \nu^2 = 0 \quad (1.6.18)$$

$$\Rightarrow \alpha = \pm \nu \quad (1.6.19)$$

となる． $\alpha = \nu$ を採用して式 (1.6.16) を用いると，

$$u_{n+2} = -\frac{1}{(n + \nu + 2)^2 - \nu^2} u_n \quad (1.6.20)$$

を得る． $\nu \in \mathbb{Z}$ のときは，

$$J_\nu(z) = u_0 z^\nu \left(1 - \frac{1}{2(2\nu + 2)} z^2 + \frac{1}{2 \cdot 4(2\nu + 2)(2\nu + 4)} z^4 + \cdots + (-1)^n \frac{(2\nu)!!}{(2n)!!(2\nu + 2n)!!} z^{2n} + \cdots \right) \quad (1.6.21)$$

$$= u_0 z^\nu \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \frac{2^\nu \nu!}{2^n n! (\nu + n)! 2^{\nu+n}} z^{2n} \quad (1.6.22)$$

$$= u_0 \nu! 2^\nu \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n! (\nu + n)!} \left(\frac{z}{2} \right)^{\nu+2n} \quad (1.6.23)$$

となる． $\nu \notin \mathbb{Z}$ のときも，表せるようにガンマ函数を用いて一般化する．式 (1.6.10) の形より，明らかに定数倍が許容されるから，

$$u_0 = \frac{1}{2^\nu \Gamma(\nu + 1)} \quad (1.6.24)$$

となるように u_0 を定めておくと，

$$J_\nu(z) = \sum_n \frac{(-1)^n}{n! \Gamma(\nu + k + 1)} \left(\frac{z}{2} \right)^{\nu+2n} \quad (1.6.25)$$

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

$$J_{-\nu}(z) = \sum_n \frac{(-1)^n}{n! \Gamma(-\nu + k + 1)} \left(\frac{z}{2} \right)^{-\nu+2n} \quad (1.6.26)$$

となり，これは $\nu \notin \mathbb{Z}$ のときに $J_\nu(z)$ と独立な解となることが示せる． $J_{-\nu}(z)$ を Neumann 函数という．

得られた Bessel 函数と Neumann 函数を用いて，

$$j_n(z) := \sqrt{\frac{\pi}{2z}} J_{n+\frac{1}{2}}(z) \quad (1.6.27)$$

$$y_n(z) := (-1)^{n+1} \sqrt{\frac{\pi}{2z}} J_{-n-\frac{1}{2}}(z) \quad (1.6.28)$$

$$(1.6.29)$$

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

$$h_n^{(1)}(z) := j_n(z) + i y_n(z) \quad (1.6.30)$$

$$h_n^{(2)}(z) := j_n(z) - i y_n(z) \quad (1.6.31)$$

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

Chapter 2

物理現象

2.1 Schrödinger 方程式

1 次元調和振動子モデルを考えよう。Schrödinger 方程式は、

$$\left(-\frac{\hbar}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2\right)\psi(x) = E\psi(x) \quad (2.1.1)$$

である。いささか唐突だが、波動関数が、

$$\psi(x) = f(s) \exp\left(-\frac{s^2}{2}\right) \quad (2.1.2)$$

$$s := \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \quad (2.1.3)$$

と書けたとする。 $f(s)$ が Hermite 多項式となることを示す。

式 (2.1.1) の両辺を $-\frac{\hbar^2}{2m}$ で割って、 x から s に変数変換¹すると、

$$\left(-\frac{\hbar}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2\right)\psi(x) = E\psi(x) \quad (2.1.4)$$

$$\Leftrightarrow \left[\frac{d^2}{dx^2} - \frac{m^2\omega^2}{\hbar^2}x^2 + \frac{2mE}{\hbar}\right]\psi(x) = 0 \quad (2.1.5)$$

$$\Leftrightarrow \left[\left(\frac{ds}{dx}\right)^2 \frac{d^2}{ds^2} - \frac{\hbar}{m\omega} s^2 + \frac{2mE}{\hbar^2}\right]f(s) \exp\left(-\frac{s^2}{2}\right) = 0 \quad (2.1.6)$$

$$\Leftrightarrow \left[\frac{m\omega}{\hbar} \frac{d^2}{ds^2} - \frac{\hbar}{m\omega} s^2 + \frac{2mE}{\hbar^2}\right]f(s) \exp\left(-\frac{s^2}{2}\right) = 0 \quad (2.1.7)$$

$$\Leftrightarrow \left(\frac{d^2}{ds^2} - s^2 + \frac{2E}{\hbar\omega}\right)f(s) \exp\left(-\frac{s^2}{2}\right) = 0 \quad (2.1.8)$$

と書ける。第 1 項について、 $\frac{d^2}{ds^2}f(s) \exp\left(-\frac{s^2}{2}\right)$ を計算しよう。 Leibniz 則より、

$$\frac{d^2}{ds^2}f(s) \exp\left(-\frac{s^2}{2}\right) = \frac{d^2f}{ds^2} \exp\left(-\frac{s^2}{2}\right) + 2\frac{df}{ds} \frac{d}{ds}\left(\exp\left(-\frac{s^2}{2}\right)\right) + f(s) \frac{d^2}{ds^2}\left(\exp\left(-\frac{s^2}{2}\right)\right) \quad (2.1.9)$$

$$= \frac{d^2f}{ds^2} \exp\left(-\frac{s^2}{2}\right) - 2s \frac{df}{ds} \exp\left(-\frac{s^2}{2}\right) + f(s)(s^2 - 1) \exp\left(-\frac{s^2}{2}\right) \quad (2.1.10)$$

¹この変数変換は x の無次元化ともとらえられる。実際に式 (2.1.3) の右辺の次元を調べると、

$$\sqrt{\frac{\text{kg} \cdot \text{s}^{-1}}{\text{kg} \cdot \text{m}^2 \cdot \text{s}^{-2} \cdot \text{s}}} \text{m} = 1$$

である。

$$= \left(\frac{d^2}{ds^2} - 2s \frac{d}{ds} + (s^2 - 1) \right) f(s) \exp \left(-\frac{s^2}{2} \right) \quad (2.1.11)$$

と計算できるから、式 (2.1.8) は、

$$\left(\frac{d^2}{ds^2} - s^2 + \frac{2E}{\hbar\omega} \right) f(s) \exp \left(-\frac{s^2}{2} \right) = 0 \quad (2.1.12)$$

$$\Leftrightarrow \left(\frac{d^2}{ds^2} - 2s \frac{d}{ds} + (s^2 - 1) - s^2 + \frac{2E}{\hbar\omega} \right) f(s) \exp \left(-\frac{s^2}{2} \right) = 0 \quad (2.1.13)$$

$$\Rightarrow \left(\frac{d^2}{ds^2} - 2s \frac{d}{ds} + \frac{2E}{\hbar\omega} - 1 \right) f(s) = 0 \quad (2.1.14)$$

となる．Hermite 多項式の形は、

$$\left(\frac{d^2}{ds^2} - 2s \frac{d}{ds} + 2n \right) H_n(s) = 0 \quad (2.1.15)$$

であったから、

$$\frac{2E}{\hbar\omega} - 1 = 2n \quad (2.1.16)$$

$$f(s) \rightarrow H_n(s) \quad (2.1.17)$$

とすれば良いことがわかる． n は非負整数で、 $n = 0$ では零点振動に対応する．規格化定数を A とすれば、波動関数は、

$$\psi_n(x) = AH_n(s) \exp \left(-\frac{s^2}{2} \right) \quad (2.1.18)$$

と書ける．規格化定数は、

$$1 = \int dx |\psi(x)|^2 \quad (2.1.19)$$

$$= |A|^2 \int dx H_n(s) H_n(s) e^{-s^2} \quad (2.1.20)$$

$$= |A|^2 \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \int ds H_n(s) H_n(s) e^{-s^2} \quad (2.1.21)$$

$$= |A|^2 \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \sqrt{\pi} 2^n n! \quad (2.1.22)$$

より、

$$A = \sqrt{\frac{1}{2^n n!}} \sqrt{\frac{m\omega}{\pi \hbar}} \quad (2.1.23)$$

となる．波動関数は、

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{1}{2^n n!}} \sqrt{\frac{m\omega}{\pi \hbar}} H_n \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \right) \exp \left(-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2 \right) \quad (2.1.24)$$

となる．

2.2 Helmholtz 方程式

Helmholtz 方程式、

$$(\nabla^2 + \kappa^2) u(r, \theta, \phi) = 0 \quad (2.2.1)$$

を考える．Helmholtz が登場する物理系を少し検討しよう． $u(\mathbf{r})$ を直交基底である $e^{im\phi}$ で展開すると，

$$A_m(r, \theta) := \int_0^{2\pi} u(r, \theta, \phi) e^{-im\phi} d\phi \quad (2.2.2)$$

$$u(r, \theta, \phi) = \sum_m A_m(r, \theta) e^{im\phi} \quad (2.2.3)$$

$$(2.2.4)$$

となる．また，極座標ラプラシアンは，

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \quad (2.2.5)$$

である．式 (2.2.1) に式 (2.2.5) を用いて，式 (2.2.3) を代入すると，

$$\begin{aligned} & \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \sum_m A_m(r, \theta) e^{im\phi} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \sum_m A_m(r, \theta) e^{im\phi} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \sum_m A_m(r, \theta) e^{im\phi} \\ & + \kappa^2 \sum_m A_m(r, \theta) e^{im\phi} = 0 \end{aligned} \quad (2.2.6)$$

$$\Leftrightarrow \sum_m e^{im\phi} \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} A_m(r, \theta) \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} A_m(r, \theta) \right) - \frac{m^2}{r^2 \sin^2 \theta} A_m(r, \theta) + \kappa^2 A_m(r, \theta) \right] = 0 \quad (2.2.7)$$

となる．式 (2.2.7) に左から $\int_0^{2\pi} d\phi e^{-im\phi}$ をかける，すなわち， $e^{im\phi}$ に射影すると，

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} A_m(r, \theta) \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} A_m(r, \theta) \right) - \frac{m^2}{r^2 \sin^2 \theta} A_m(r, \theta) + \kappa^2 A_m(r, \theta) = 0 \quad (2.2.8)$$

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

$$\mathcal{L}_m = \frac{d}{dx} \left\{ (1 - \cos^2 \theta) \frac{d}{dx} \right\} - \frac{m^2}{1 - \cos^2 \theta} \quad (2.2.9)$$

$$= \frac{d}{dx} \left\{ \sin^2 \theta \frac{d}{dx} \right\} - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} \quad (2.2.10)$$

$$= \frac{d\theta}{dx} \frac{d}{dx} \left\{ \sin^2 \theta \frac{d\theta}{dx} \frac{d}{dx} \right\} - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} \quad (2.2.11)$$

$$= -\frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{dx} \left\{ \sin^2 \theta \left(-\frac{1}{\sin \theta} \right) \right\} - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} \quad (2.2.12)$$

$$= \frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{dx} \left\{ \sin \theta \frac{d}{d\theta} \right\} - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} \quad (2.2.13)$$

であるから，式 (2.2.8) は，

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} A_m(r, \theta) \right) + \frac{1}{r^2} \mathcal{L}_{|m|} A_m(r, \theta) + \kappa^2 A_m(r, \theta) = 0 \quad (2.2.14)$$

となる．

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

$$A_m(r, \theta) = \sum_{n=|m|}^{\infty} B_{nm}(r) P_n^{|m|}(\cos \theta) \quad (2.2.15)$$

と展開する．式 (2.2.14) の両辺に $P_n^{|m|}(\cos \theta)$ との内積をとる．式 (1.5.33) より，

$$\langle P_n^m(\cos \theta), P_n^m(\cos \theta) \rangle = \delta_n^{n'} \frac{2}{2n+1} \frac{(n+m)!}{(n-m)!} \quad (2.2.16)$$

であることと、式 (1.5.5) より、

$$\mathcal{L}_m P_n^m(x) + n(n+1)P_n^m(x) = 0 \quad (2.2.17)$$

であることを用いれば、

$$\left\langle P_n^m(\cos \theta), \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} A_m(r, \theta) \right) + \frac{1}{r^2} \mathcal{L}_{|m|} A_m(r, \theta) + \kappa^2 A_m(r, \theta) \right\rangle = 0 \quad (2.2.18)$$

$$\Leftrightarrow \frac{1}{r^2} \left\langle P_n^m(\cos \theta), \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} A_m(r, \theta) \right) \right\rangle + \frac{1}{r^2} \langle P_n^m(\cos \theta), \mathcal{L}_{|m|} A_m(r, \theta) \rangle + \langle P_n^m(\cos \theta), \kappa^2 A_m(r, \theta) \rangle = 0 \quad (2.2.19)$$

$$\begin{aligned} \Leftrightarrow \frac{1}{r^2} \left\{ \frac{d}{dr} r^2 \left\{ \frac{d}{dr} B_{nm}(r) \right\} \right\} \langle P_n^m(\cos \theta), P_n^m(\cos \theta) \rangle + \frac{1}{r^2} B_{nm}(r) \langle P_n^m(\cos \theta), \mathcal{L}_{|m|} P_n^m(\cos \theta) \rangle \\ + \kappa^2 B_{nm}(r) \langle P_n^m(\cos \theta), P_n^m(\cos \theta) \rangle = 0 \end{aligned} \quad (2.2.20)$$

$$\Leftrightarrow \left(\frac{1}{r^2} \left\{ \frac{d}{dr} r^2 \left\{ \frac{d}{dr} B_{nm}(r) \right\} \right\} - \frac{1}{r^2} n(n+1) B_{nm}(r) + \kappa^2 B_{nm}(r) \right) \langle P_n^m(\cos \theta), P_n^m(\cos \theta) \rangle = 0 \quad (2.2.21)$$

$$\Rightarrow \frac{1}{r^2} \left\{ \frac{d}{dr} r^2 \left\{ \frac{d}{dr} B_{nm}(r) \right\} \right\} - \frac{1}{r^2} n(n+1) B_{nm}(r) + \kappa^2 B_{nm}(r) = 0 \quad (2.2.22)$$

を得る。

式 (2.2.22) において、

$$\rho := \kappa r \quad (2.2.23)$$

と変数変換して、

$$C_{nm}(\rho) := \sqrt{\rho} B_{nm}(r) \quad (2.2.24)$$

と定義して代入すれば、

$$\left\{ \frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} + 1 - \frac{1}{\rho^2} \left(n + \frac{1}{2} \right)^2 \right\} C_{nm}(\rho) = 0 \quad (2.2.25)$$

を得る。式 (2.2.25) と式 (1.6.9) である、

$$\mathcal{L}_\nu J_\nu(z) = -J_\nu(z) \quad (2.2.26)$$

$$\Leftrightarrow \left(\frac{d^2}{dz^2} + \frac{1}{z} \frac{d}{dz} + 1 - \frac{\nu^2}{z^2} \right) = 0 \quad (2.2.27)$$

を比べると、式 (2.2.27) において、

$$z \rightarrow \rho \quad (2.2.28)$$

$$\nu = n + \frac{1}{2} \quad (2.2.29)$$

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

$$C_{nm}(\rho) = a''_{nm} J_{n+\frac{1}{2}}(\rho) + b''_{nm} J_{-n-\frac{1}{2}}(\rho) \quad (2.2.30)$$

と書く。今後の変形のために、球 Bessel 関数 $j_n(\rho)$ と球 Neumann 関数 $y_n(\rho)$ を用いて式 (2.2.30) を書き直せば、

$$C_{nm}(\rho) = a''_{nm} J_{n+\frac{1}{2}}(\rho) + b''_{nm} J_{-n-\frac{1}{2}}(\rho) \quad (2.2.31)$$

$$= \sqrt{\frac{2\rho}{\pi}} a''_{nm} j_n(\rho) + \sqrt{\frac{2\rho}{\pi}} b''_{nm} y_n(\rho) \quad (2.2.32)$$

$$= \sqrt{\rho} [a'_{nm} j_n(\rho) + b'_{nm} y_n(\rho)] \quad (2.2.33)$$

である。ただし,

$$a'_{nm} := a''_{nm} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \quad (2.2.34)$$

$$b'_{nm} := b''_{nm} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \quad (2.2.35)$$

と定めた。

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

$$\text{式 (2.2.3) より } u(r, \theta, \phi) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} A_m(r, \theta) e^{im\phi} \quad (2.2.36)$$

$$\text{式 (2.2.15) より } A_m(r, \theta) = \sum_{n=|m|}^{\infty} B_{nm}(r) P_n^{|m|}(\cos \theta) \quad (2.2.37)$$

$$\text{式 (2.2.23) より } \rho = \kappa r \quad (2.2.38)$$

$$\text{式 (2.2.24) より } B_{nm}(r) = \frac{1}{\sqrt{\rho}} C_{nm}(\rho) \quad (2.2.39)$$

$$\text{式 (2.2.33) より } C_{nm}(\rho) = \sqrt{\rho} [a'_{nm} j_n(\rho) + b'_{nm} y_n(\rho)] \quad (2.2.40)$$

となる。下から上に全て代入して整理すると,

$$u(r, \theta, \phi) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \sum_{n=|m|}^{\infty} [a'_{nm} j_n(\kappa r) + b'_{nm} y_n(\kappa r)] P_n^{|m|}(\cos \theta) e^{im\phi} \quad (2.2.41)$$

となる。今後の計算を行うとき,

$$\langle e^{im'\phi}, e^{im\phi} \rangle = 2\pi \delta_m^{m'} \quad (2.2.42)$$

$$\langle P_n^m(x), P_n^m(x) \rangle = \delta_n^{n'} \frac{2}{2n+1} \frac{(n+m)!}{(n-m)!} \quad (2.2.43)$$

のように規格化されていないのはいささか都合が悪いので, 球面分布関数 $Y_{nm}(\theta, \phi)$ を,

$$Y_{nm}(\theta, \phi) := (-1)^m \left(\frac{1}{2\pi} \right)^{1/2} \left(\frac{2n+1}{2} \frac{(n-m)!}{(n+m)!} \right)^{1/2} P_n^m(\cos \theta) e^{im\phi} \quad (2.2.44)$$

$$= (-1)^m \sqrt{\frac{2n+1}{4\pi} \frac{(n-m)!}{(n+m)!}} P_n^m(\cos \theta) e^{im\phi} \quad (2.2.45)$$

として定義しておく。球面分布関数を用いて式 (2.2.41) を書き換えれば, 定数倍は a'_{nm} や b'_{nm} で吸収することにして,

$$u(r, \theta, \phi) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \sum_{n=|m|}^{\infty} [a_{nm} j_n(\kappa r) + b_{nm} y_n(\kappa r)] Y_{nm}(\theta, \phi) \quad (2.2.46)$$

となる。当然,

$$a_{nm} := \left[(-1)^m \sqrt{\frac{2n+1}{4\pi} \frac{(n-m)!}{(n+m)!}} \right]^{-1} a'_{nm} \quad (2.2.47)$$

$$b_{nm} := \left[(-1)^m \sqrt{\frac{2n+1}{4\pi} \frac{(n-m)!}{(n+m)!}} \right]^{-1} b'_{nm} \quad (2.2.48)$$

である。