Several Special Function

Eun Taek Kang

January 2025

1 Differential Equations

1.1 Gamma Function

Gamma Function은 우리가 일반적으로 쓰던 팩토리얼을 일반화한 것이다. 이 함수는 복소수 입력에 의해 정의되는데, 일단 정수 n에 대한 Gamma Function은 다음과 같다.

$$\Gamma(n) = (n-1)! \tag{1.1}$$

다만, 팩토리얼은 양의 정수값에 대해서만 정의되고, 우리는 이 팩토리얼을 일반화하는데 목적을 두고 있다. 따라서 복소수 z에 대해서 Gamma Function을 다시 정의하자.

$$\Gamma(z) = \int_0^\infty t^{z-1}e^{-t}dt, \quad \mathrm{Re}(z) > 0 \tag{1.2}$$

정의에 따르면, 복소수 z의 실수부가 양수여야 함숫값이 수렴해 존재함을 알 수 있다. 만약, z가 음의 정수라면 어떻게 될까? 이때, Gamma Function은 특이점(pole)을 가진다.

$$\Gamma(-1) = \Gamma(-2) = \cdots = \infty \tag{1.3}$$

만약, 음의 정수가 아닌 $\mathrm{Re}(z) < 0$인 복소수가 투입된다면? Reflection Formula(Eq 1.5)를 사용한다. 아래는 감마 함수에 대한 몇가지 성질들이다.

$$\Gamma(z+1) = z\Gamma(z) \tag{1.4}$$

$$\Gamma(z)\Gamma(1-z) = \frac{\pi}{\sin \pi z} \tag{1.5}$$

Gamma Function을 확장하면 다음 두 가지 함수를 얻는다.

$$\psi(z) = \frac{d}{dz}\ln\Gamma(z) \tag{1.6}$$

$$B(x,y) = \int_0^1 t^{x-1}(1-t)^{y-1}dt = \frac{\Gamma(x)\Gamma(y)}{\Gamma(x+y)} \tag{1.7}$$

(1.6)은 Digamma Function으로, Gamma Function의 로그 미분을 의미하고, (1.7)은 Beta Function으로, Gamma Function을 이용해 정의하는 함수의 예이다. 이처럼 Gamma Function을 통해 정수가 아닌 수들의 팩토리얼을 계산하고, 이를 통해 통계역학, 양자역학에서 쓰이는 다양한 특수 함수들을 정의할 수 있다.

1.2 Bessel Function

Bessel Function은 원통 좌표계와 같이 Cylindrical Symmetry를 가진 문제에서 얻어낼 수 있는 특수 함수이다. 이 함수는 Bessel Differential Equation의 해인데, 베셀 미분방정식의 꼴은 다음과 같다.

$$x^2\frac{d^2y}{dx^2} + x\frac{dy}{dx} + (x^2 - n^2)y = 0, \quad n \in \mathbb{R} \tag{1.8}$$

Bessel 함수는 크게 2종류로 나뉘는데, 1종 Bessel Function($J_n(x)$), 2종 Bessel Function($Y_n(x)$)가 있다. 그 형태는 아래와 같다.

$$J_n(x) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{k!\,\Gamma(k+n+1)} \left(\frac{x}{2}\right)^{2k+n} \tag{1.9}$$

$$Y_n(x) = \frac{J_n(x)\cos(n\pi) - J_{-n}(x)}{\sin(n\pi)} \tag{1.10}$$

1종 Bessel Function은 $x = 0$에서 값을 가지고, 주기성을 띤다. 2종 Bessel Function은 $x = 0$에서 특이점을 가지고, $J_n(x)$와 독립적인 해이다. 다만, 표현은 1종 Bessel Funcrion을 기반으로 정의된다.
Bessel Function은 앞서 본 것처럼 원통 대칭성을 띤 문제에서 등장하는데, Cylindrical Coordinate에서 Wave Equation이나 EM Field에 대해 Helmholtz Equation이나 Laplace Equation을 풀 때, 등장한다. 더 넘어가 Quantum Mechanics에서도 대칭성을 가진 Potential에 대해 파동 함수를 분석할 때 사용할 수 있는 함수이다.
1종 Bessel Function같은 경우, 특정 구간에서 정규화(normalization)되고, 직교(orthogonal)하다. 이는 3학년 과목에서 좀 더 자세히 다룰 것이므로 정규화 및 직교화 표현만 소개한다. $J_n(x)$의 영점 α_m, α_k에 대하여 다음이 성립한다.

$$\int_0^1 J_n(\alpha_m x) J_n(\alpha_k x) x\, dx = 0 \quad \text{if } m \neq k \tag{1.11}$$

$$J_n(x) \sim \sqrt{\frac{2}{\pi x}} \cos\left(x - \frac{n\pi}{2} - \frac{\pi}{4}\right), \quad x \gg 1 \tag{1.12}$$

$$J_{n-1}(x) + J_{n+1}(x) = \frac{2n}{x} J_n(x) \tag{1.13}$$

만약, 원통형 대칭이 아닌 구형 대칭 및 Spherical Coordinate에선 Bessel Function이 어떻게 변할까? 이때 Spherical Bessel Function이 등장하고, 이때 1, 2종 구면 베셀 함수인 j_n, y_n은 다음과 같다.

$$j_n(x) = \sqrt{\frac{\pi}{2x}} J_{n+1/2}(x) \tag{1.14}$$

$$y_n(x) = \sqrt{\frac{\pi}{2x}} Y_{n+1/2}(x) \tag{1.15}$$

1.3 Legendre Function

Legendre Function은 구면 대칭성 혹은 구면 좌표계에서 Laplace Equation을 풀 때 유도되는 특수 함수이다. 이는 여러 Legendre Differential Equation을 만족하는 해인데, 르장드르 미분방정식의 두 꼴은 다음과 같다.

$$\left(1 - x^2\right) \frac{d^2y}{dx^2} - 2x\frac{dy}{dx} + l(l+1)y = 0, \quad l \in \mathbb{Z} - \mathbb{Z}^-, \quad x \in [-1, 1] \tag{1.16}$$

$$\left(1 - x^2\right) \frac{d^2y}{dx^2} - 2x\frac{dy}{dx} + \left[l(l+1) - \frac{m^2}{1 - x^2}\right] y = 0, \quad m = -l, -l+1, \cdots, l \tag{1.17}$$

Legendre Function은 크게 2가지로 나뉘는데, Legendre Polynomial($P_l(x)$)과 Associated Legendre Function($P_l^m(x)$)로 나뉜다.
Legendre Polynomial은 다음과 같은 생성 함수로 정의된다.

$$\sum_{l=0}^{\infty} P_l(x) t^l = \frac{1}{\sqrt{1 - 2xt + t^2}} \tag{1.18}$$

그리고, 재귀성, 구간 [-1. 1]에서의 직교성, 정규화된 직교성에 대해 다음과 같은 성질들을 만족한다.

$$(l+1)P_{l+1}(x) = (2l+1)xP_l(x) - lP_{l-1}(x) \tag{1.19}$$

$$\int_{-1}^{1} P_l(x)P_{l'}(x)\,dx = 0, \quad \text{if } l \neq l' \tag{1.20}$$

$$\int_{-1}^{1} P_l(x)P_l(x)\,dx = \frac{2}{2l+1} \tag{1.21}$$

초반 차수의 Legendre 다항식은 다음과 같다.

$$P_0(x) = 1, \quad P_1(x) = x, \quad P_2(x) = \frac{1}{2}(3x^2 - 1), \quad P_3(x) = \frac{1}{2}(5x^3 - 3x)$$

(1.17)을 만족하는 함수를 Associated Legendre Function이라고 하고, 그 꼴은 다음과 같이 정의된다.

$$P_l^m(x) = (1-x^2)^{m/2}\frac{d^m}{dx^m}P_l(x), \quad m \geq 0 \tag{1.22}$$

연관 Legendre Function은 추후 설명할 구면조화 함수(Spherical Harmonics)을 구성하는 요소로 사용된다. Spherical Harmonics의 식은 다음과 같다.

$$Y_l^m(\theta,\phi) = \sqrt{\frac{(2l+1)(l-m)!}{4\pi(l+m)!}}P_l^m(\cos\theta)e^{im\phi} \tag{1.23}$$

Legendre Functions의 두 종류인 $P_l(x)$와 $P_l^m(x)$는 Spherical Coordinate에서 서로 orthogonal하다는 특징이 있다. 이를 통해 Radition Direction의 조화를 표현할 수 있고, 구 대칭 문제에서 Laplace Equation을 분리하면 $P_l(x)$와 $P_l^m(x)$가 등장한다. 이를 통해 구형 원자에서 전자 파동함수, 원자 궤도함수, 전위, 중력당을 계산할 때 유용하게 표현할 수 있다.

1.4 Spherical Harmonics (Ylm)

Spherical Harmonics는 구면 좌표계에서 Laplace Equation을 해결하는 과정에 있어서 필수적으로 사용되는 함수이다. 구면 조화 함수는 다음과 같이 정의된다.

$$Y_l^m(\theta,\phi) = N_l^m P_l^m(\cos\theta)e^{im\phi}, \quad \theta \in [0,\pi], \quad \phi \in [0,2\pi] \tag{1.24}$$

여기서 l은 양의 정수로, degree를 나타내고, m은 $-l \leq +l$를 만족하는 정수이다. 이는 order를 나타낸다. $P_l^m(\cos\theta)$는 Associated Legendre Function에 $\cos\theta$를 대입한 것이다. 그리고 N_l^m은 정규화 상수로, 함수의 정규화 가능성과 직교성을 보장해주는 상수이다. 이때 Normalization constant는 다음과 같이 표현된다.

$$N_l^m = \sqrt{\frac{(2l+1)(l-m)!}{4\pi(l+m)!}} \tag{1.25}$$

이때, 구면 조화 함수 Spherical Harmonics는 구면 좌표계에서의 Laplace 방정식인 다음을 만족한다. 따라서 변수 분리법을 통해 Laplace Equation을 풀면 나오는 함수임을 알 수 있다. 이때, $x = \cos\theta$라 하고, θ에 대한 Legendre Equation을 쓰면 (1.27)과 같다.

$$\nabla^2 Y_l^m = 0 \tag{1.26}$$

$$\frac{d}{dx}\left[(1-x^2)\frac{dP_l^m}{dx}\right] + \left[l(l+1) - \frac{m^2}{1-x^2}\right]P_l^m = 0 \tag{1.27}$$

여기서, ϕ에 대한 간단한 해는 $e^{im\phi}$이다. 이는 주기성을 띈 경계 조건을 만족한다. 따라서 구면조화 함수에도 포함되었다. $e^{im\phi}$는 복소 지수함수이다.
구면 조화 함수는 구면 위에서 서로 직교하고, 직교성은 다음과 같이 나타낼 수 있다.

$$\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi} Y_l^m(\theta,\phi)\overline{Y_{l'}^{m'}(\theta,\phi)}\sin\theta\,d\theta\,d\phi = \delta_{ll'}\delta_{mm'} \tag{1.28}$$

여기서 Associated Legendre Function에 대해서 다음과 같은 재귀 관계가 성립한다.

$$(l-m+1)P_{l+1}^{m}(x) = (2l+1)xP_{l}^{m}(x) - (l+m)P_{l-1}^{m}(x) \tag{1.29}$$

이런 구면 조화 함수들은 원형 원자에서 전자들의 궤도나 파동함수를 분석하면서 Orbital의 개념과 연관지을 수 있다. 실제로 주양자수, 방위 양자수, 자기 양자수와 Notation이 일맥상통하는 부분을 보면서도 체감할 수 있다.
구면 조화 함수에선 l이 진동의 복잡성을 나타내고, m이 진동의 방향성을 나타낸다. 가령 $l=0, m=0$이면 함수가 구형으로 나타나고, $l=1, m=-1,0,1$이면 아령형의 쌍극자 모양, $l=2$이면 사중극자 모양이다.
다음 그림들은 Spherical Harmonics Y_1^{-1}, Y_2^0, Y_3^2를 시각화한 것을 나타낸 그림이다.

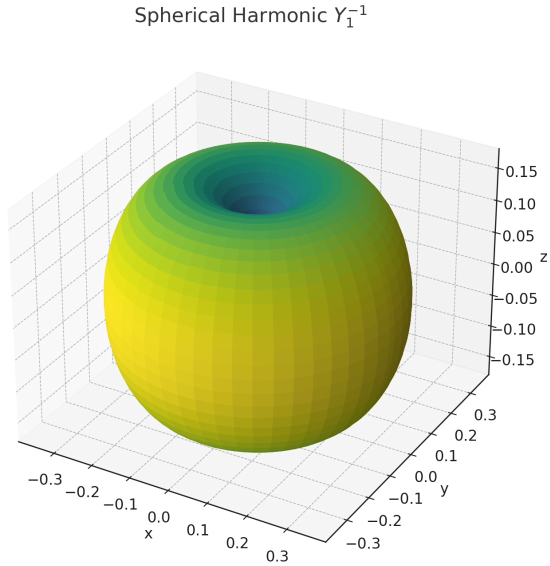

Figure 1: Spherical Harmonics Y_1^{-1}의 시각화

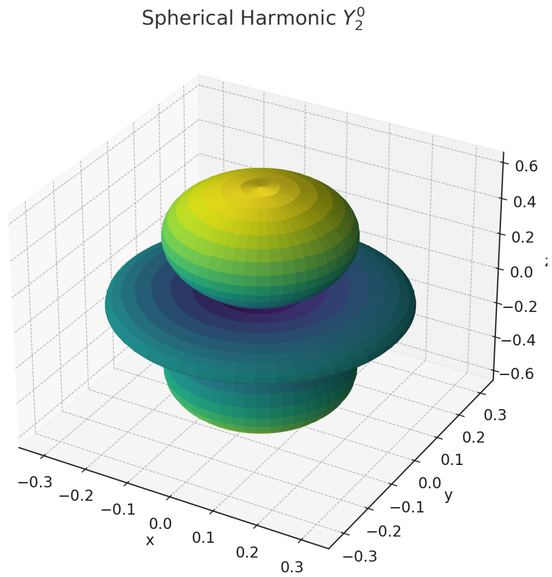

Figure 2: Spherical Harmonics Y_2^0의 시각화

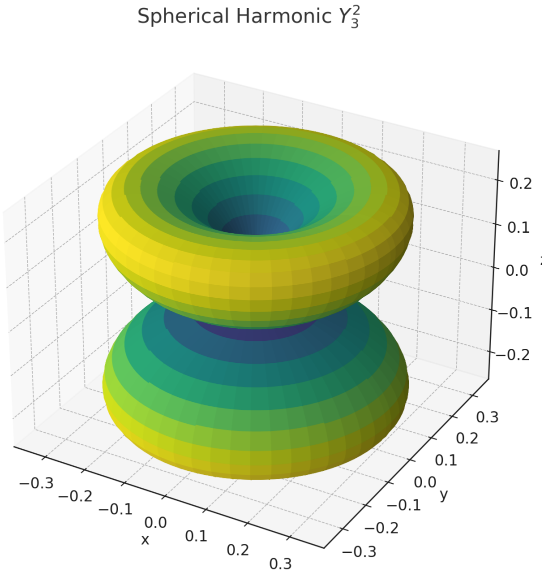

Figure 3: Spherical Harmonics Y_3^2의 시각화

이를 좀 더 일반화해서 Spherical Harmonics로 얻을 수 있는 시각화는 다음과 같다.

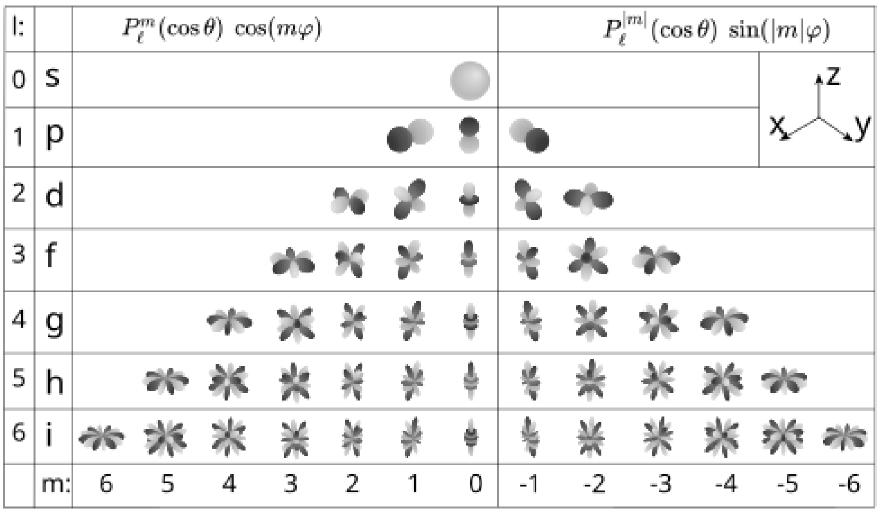

Figure 4: Spherical Harmonics의 시각화 모식도