数学公式（filename=mathformula060610.tex）

1 二次方程式の根と係数の関係

$$ax^2+bx+c=0, \ \rightarrow x=\frac{-b\pm\sqrt{b^2-4ac}}{2a}, \tag{1.1}$$

$$x_1+x_2=-\frac{b}{a}, \ \ x_1x_2=\frac{c}{a}, \tag{1.2}$$

$$ax^2+2b'x+c=0, \ \rightarrow x=\frac{-b'\pm\sqrt{b'^2-ac}}{a}. \tag{1.3}$$

2 三角関数

1. 加法定理

$$\sin(A\pm B)=\sin A\cos B\pm\cos A\sin B, \tag{2.1}$$

$$\cos(A\pm B)=\cos A\cos B\mp\sin A\sin B, \tag{2.2}$$

$$\tan(A\pm B)=\frac{\tan A\pm\tan B}{1\mp\tan A\tan B}, \tag{2.3}$$

$$\sin(A\pm\frac{\pi}{2})=\pm\cos A, \tag{2.4}$$

$$\sin(A\pm\pi)=-\sin A, \tag{2.5}$$

$$\cos(A\pm\frac{\pi}{2})=\mp\sin A, \tag{2.6}$$

$$\cos(A\pm\pi)=-\cos A, \tag{2.7}$$

$$\tan(A\pm\frac{\pi}{2})=-\frac{1}{\tan A}, \tag{2.8}$$

$$\tan(A\pm\pi)=\tan A. \tag{2.9}$$

2. 和を積に直す公式

$$\sin A+\sin B=2\sin(\frac{A+B}{2})\cos(\frac{A-B}{2}), \tag{2.10}$$

$$\sin A-\sin B=2\cos(\frac{A+B}{2})\sin(\frac{A-B}{2}), \tag{2.11}$$

$$\cos A+\cos B=2\cos(\frac{A+B}{2})\cos(\frac{A-B}{2}), \tag{2.12}$$

$$\cos A-\cos B=-2\sin(\frac{A+B}{2})\sin(\frac{A-B}{2}), \tag{2.13}$$

$$\tan A\pm\tan B=\frac{\sin(A\pm B)}{\cos A\cos B}. \tag{2.14}$$

3. 積を和に直す公式

$$\sin A\sin B=-\frac{1}{2}[\cos(A+B)-\cos(A-B)], \tag{2.15}$$

$$\sin A \cos B = \frac{1}{2}[\sin(A+B) + \sin(A-B)], \tag{2.16}$$

$$\cos A \sin B = \frac{1}{2}[\sin(A+B) - \sin(A-B)], \tag{2.17}$$

$$\cos A \cos B = \frac{1}{2}[\cos(A+B) + \cos(A-B)]. \tag{2.18}$$

3 級数

3.1 自然数の級数

$$\sum_{k=1}^{n} k = \frac{1}{2}n(n+1), \tag{3.1}$$

$$\sum_{k=1}^{n} k^2 = \frac{1}{6}n(n+1)(2n+1), \tag{3.2}$$

$$\sum_{k=1}^{n} k^3 = \frac{1}{4}n^2(n+1)^2. \tag{3.3}$$

3.2 三角関数を含む級数和

$$\begin{aligned} \sum_{r=1}^{n} \cos rx &\equiv \cos x + \cos 2x + \cdots + \cos nx \\ &= \frac{\cos(\frac{n+2}{2}x)\sin(\frac{nx}{2})}{\sin(\frac{x}{2})} \end{aligned} \tag{3.4}$$

$$\begin{aligned} \sum_{r=1}^{n} \sin rx &\equiv \sin x + \sin 2x + \cdots + \sin nx \\ &= \frac{\sin(\frac{n+2}{2}x)\sin(\frac{nx}{2})}{\sin(\frac{x}{2})} \end{aligned} \tag{3.5}$$

$$\begin{aligned} \sum_{r=-n}^{n} \cos rx &\equiv \cos(-nx) + \cdots + \cos 0x + \cdots + \cos nx \\ &= \frac{\sin[(2n+1)\frac{x}{2}]}{\sin(\frac{x}{2})} \end{aligned} \tag{3.6}$$

$$\begin{aligned} \sum_{r=-n}^{n} \sin rx &\equiv \sin(-nx) + \cdots + \sin 0x + \cdots + \sin nx \\ &= 0. \end{aligned} \tag{3.7}$$

4　微分公式

4.1　初等関数の微分（常微分）

変数 x の関数の微分 (係数）の計算

以下 c などは定数を表し、f, g などは変数 x の関数を表す。

$$\frac{df(x)}{dx} \equiv \lim_{\Delta x \to o} \frac{f(x+\Delta x) - f(x)}{\Delta x}, \tag{4.1}$$

$$\frac{dc}{dx} = 0, \tag{4.2}$$

$$\frac{dx}{dx} = 1, \tag{4.3}$$

$$\frac{d\sin x}{dx} = \cos x, \tag{4.4}$$

$$\frac{d\cos x}{dx} = -\sin x, \tag{4.5}$$

$$\frac{d\tan x}{dx} = \frac{1}{\cos^2 x}, \tag{4.6}$$

$$\frac{d\mathrm{e}^x}{dx} = \mathrm{e}^x, \tag{4.7}$$

$$\frac{d\log_e x}{dx} (= \frac{d\ln x}{dx}) = \frac{1}{x}, \tag{4.8}$$

$$\tag{4.9}$$

5　積分公式

5.1　指数関数を含む積分

(pp.232-233,[2])

$$\int_0^\infty \exp(-ax^2) dx = \frac{\sqrt{\pi}}{2\sqrt{a}} \ \ (\to \int_{-\infty}^\infty \exp(-ax^2) dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}} \ \ ) \tag{5.1}$$

$$\int_0^\infty \exp(-ax^2) x^2 dx = \frac{1}{4a}\sqrt{\frac{\pi}{a}} \ \ (\to \int_{-\infty}^\infty \exp(-ax^2) x^2 dx = \frac{1}{2a}\sqrt{\frac{\pi}{a}} \ \ ) \tag{5.2}$$

$$\int_0^\infty \exp(-ax^2) x^{2n} dx = \frac{(2n-1)!!}{2^{n+1}}\sqrt{\frac{\pi}{a^{2n+1}}}. \tag{5.3}$$

$$\int_0^\infty \exp(-ax^2) x dx = \frac{1}{2a}. \ \ (\to \int_{-\infty}^\infty \exp(-ax^2) x dx = \frac{1}{a}. \ \ ) \tag{5.4}$$

$$\int_0^\infty \exp(-ax^2) x^3 dx = \frac{1}{2a^2}. \ \ (\to \int_{-\infty}^\infty \exp(-ax^2) x^3 dx = \frac{1}{a^2}. \ \ ) \tag{5.5}$$

$$\int_0^\infty \exp(-ax^2) x^{2n+1} dx = \frac{n!}{2a^{n+1}}. \tag{5.6}$$

$$\frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty \exp(-\frac{\alpha^2}{4\xi^2}) \exp(-\xi^2 r^2) d\xi = \frac{\exp(-\alpha r)}{r}. \tag{5.7}$$

$$\int \frac{\cos(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r})}{k^2+\mu^2} d\boldsymbol{k} = 2\pi^2 \frac{\exp(-\mu r)}{r}. \tag{5.8}$$

$$\frac{2}{\sqrt{\pi}}\int_0^\infty \exp(-\mu^2 r^2)d\mu = \frac{1}{r}. \tag{5.9}$$

6　ベクトル微分演算子

ベクトル微分演算子（vector differential operators）

6.1　2次元

1. 勾配 (gradient),∇,grad
   x, y 向きの単位ベクトル (基底ベクトル）をそれぞれ $\boldsymbol{e}_x, \boldsymbol{e}_y$ とする。r, ϕ 向き、すなわちそれぞれの増加する向きの単位ベクトル (基底ベクトル)、それぞれ $\boldsymbol{e}_r, \boldsymbol{e}_\phi$ とすると
$$\begin{aligned} \nabla &= \boldsymbol{e}_x\frac{\partial}{\partial x} + \boldsymbol{e}_y\frac{\partial}{\partial y} && (6.1)\\ &= \boldsymbol{e}_r\frac{\partial}{\partial r} + \boldsymbol{e}_\phi\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial \phi} && (6.2)\end{aligned}$$
2. 回転 (rotation),$\nabla\times$, rot(=curl)
3. 発散 (divergence),$\nabla\cdot$, div
4. ラプラス演算子 $\nabla^2(\equiv \Delta)$

6.2　3次元

1. 勾配 (gradient),∇, grad
   x, y, z 向きの単位ベクトル (基底ベクトル）をそれぞれ $\boldsymbol{e}_x, \boldsymbol{e}_y, \boldsymbol{e}_z$ とする。r, ϕ, θ 向き、すなわちそれぞれの増加する向きの単位ベクトル (基底ベクトル)、それぞれ $\boldsymbol{e}_r, \boldsymbol{e}_\phi, \boldsymbol{e}_\theta$ とすると
$$\begin{aligned} \nabla &= \boldsymbol{e}_x\frac{\partial}{\partial x} + \boldsymbol{e}_y\frac{\partial}{\partial y} + \boldsymbol{e}_z\frac{\partial}{\partial z} && (6.3)\\ &= \boldsymbol{e}_r\frac{\partial}{\partial r} + \boldsymbol{e}_\theta\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial \theta} + \boldsymbol{e}_\phi\frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial \phi} && (6.4)\end{aligned}$$
2. 回転 (rotation),$\nabla\times$, rot(=curl)
3. 発散 (divergence),$\nabla\cdot$, div
4. ラプラス演算子 $\nabla^2(\equiv \Delta)$
   3次元においてラプラス演算子 ∇^2 はデカルト座標では
$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \tag{6.5}$$
   と表される。極座標 $(x = r\sin\theta\cos\phi, y = r\sin\theta\sin\phi, z = r\cos\theta)$ では
$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}) + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2} \tag{6.6}$$

$$= \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}(r^2\frac{\partial}{\partial r}) + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}) + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2} \tag{6.7}$$

$$= \frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}r + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}) + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2} \tag{6.8}$$

にように、複数の表現がある。特に、式（6.8）の表現はヘルムホルツ方程式を取り扱う場合、圧倒的に有利である。

7　ベクトル微分演算子の積分公式

7.1　グリーンの定理

閉曲面 A で囲まれた領域 V において、スカラー関数 $\varphi(x,y,z), \psi(x,y,z)$ に対して次の定理が成立する。

$$\iiint_V (\psi\nabla^2\phi + \nabla\psi\cdot\nabla\phi)dV = \iint_A \psi\frac{d\phi}{dn}dA \tag{7.1}$$

$$\iiint_V (\psi\nabla^2\phi - \phi\nabla^2\psi)dV = \iint_A \left(\psi\frac{d\phi}{dn} - \phi\frac{d\psi}{dn}\right)dA \tag{7.2}$$

ここでは、三重積分、二重積分の記号を明示的に記した。ただし、曲面の法線は領域内部から外部に向かってとり、$d\phi/dn, d\psi/dn$ はそれぞれ法線方向に対する ϕ,ψ の方向微分係数である。

8　デルタ関数

8.1　１次元デルタ関数

定義：

$$\delta(x) = \begin{cases} \infty & (x=0) \\ 0 & (x\neq 0). \end{cases} \tag{8.1}$$

ステップ関数（Heaviside's step function）

$$\theta(x) = \begin{cases} 0 & (x<0) \\ 1 & (x\geq 0). \end{cases} \tag{8.2}$$

を用いて次のようにも定義される。

$$\delta(x) \equiv \frac{d\theta(x)}{dx} \tag{8.3}$$

デルタ関数は種々の関数などの極限としても定義される。

1. パルス関数の極限

$$\delta_\varepsilon(x) = \begin{cases} 1/\varepsilon & (|x|<\varepsilon/2) \\ 0 & (|x|>\varepsilon/2). \end{cases} \tag{8.4}$$

$$\delta(x) = \lim_{\varepsilon\to 0}\delta_\varepsilon(x) \tag{8.5}$$

2. 三角関数を含む分数関数の極限

$$\delta(x) = \lim_{\alpha\to\infty} \frac{\sin \alpha x}{\pi x} \tag{8.6}$$

3. 関数 $\mathrm{e}^{-\varepsilon|k|}$ の逆フーリエ変換

$$\delta_\varepsilon(x) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{-\varepsilon|k|}\mathrm{e}^{ikx}dk = \frac{1}{2\pi}\frac{2\varepsilon}{x^2+\varepsilon^2}, \tag{8.7}$$

$$\delta(x) = \lim_{\varepsilon\to 0}\delta_\varepsilon(x) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{ikx}dk \tag{8.8}$$

$$\delta(x-a) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{ik(x-a)}dk. \tag{8.9}$$

$$\frac{\pi}{2}\frac{\delta(k-k')}{k^2} = \int_0^\infty j_\ell(kr)\cdot j_\ell(k'r)\, r^2 dr, \tag{8.10}$$

ここで $j_\ell(x)$ はベッセル関数（Bessel function）である。
デルタ関数の性質

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x)dx = 1. \tag{8.11}$$

関数 $f(x)$ が $x = a, x_n$ の付近で連続であるとすると

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\delta(x-a)dx = f(a), \tag{8.12}$$

$$f(x)\delta(x-a) = f(a)\delta(x-a), \tag{8.13}$$

$$x\delta(x) = 0, \tag{8.14}$$

$$\delta'(x) = -\delta'(-x),\ (\delta'(x) \equiv \frac{d}{dx}\delta(x)), \tag{8.15}$$

$$\delta(ax) = \frac{1}{|a|}\delta(x)\ \ (a \neq 0), \tag{8.16}$$

$$\delta(f(x)) = \sum_{i=1}^{n} \frac{1}{|f'(x_i)|}\delta(x-x_i), \tag{8.17}$$

($f(x)$ は n 個のゼロ点を持つとする。$f(x_i) = 0, i = 1, 2, \cdots, n,$ (8.18)

$$f'(x_i) \equiv \frac{df(x_i)}{dx} \neq 0), \tag{8.19}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x)[\frac{d^n}{dx^n}\delta(x)]dx = (-1)^n\frac{d^n}{dx^n}f(0). \tag{8.20}$$

式 (8.13) の証明：

8.2 2次元デルタ関数 [1]

$$\begin{aligned} \delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}') &= \delta(x-x')\delta(y-y') && (8.21)\\ &= \frac{\delta(r-r')\delta(\phi-\phi')}{r} && (8.22)\\ x &= r\cos\phi,\ y = r\sin\phi, r = \sqrt{x^2+y^2}, \tan\phi = \frac{y}{x}. && (8.23) \end{aligned}$$

8.3　3次元デルタ関数

3次元デルタ関数のデカルト座標表示

$$\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}') = \delta(x-x')\delta(y-y')\delta(z-z'). \tag{8.24}$$

極座標表示 $\boldsymbol{r}=(r,\theta,\phi)$

$$x = r\sin\theta\cos\phi,\ \ y = r\sin\theta\sin\phi,\ \ z = r\cos\theta, \tag{8.25}$$

$$r = \sqrt{x^2+y^2+z^2},\ \ \tan\phi = \frac{y}{x},\ \ \tan\theta = \frac{\sqrt{x^2+y\ 2}}{z} \tag{8.26}$$

を用いると、3次元デルタ関数は

$$\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}') = \frac{\delta(r-r')\delta(\cos\theta-\cos\theta')\delta(\phi-\phi')}{r^2} \tag{8.27}$$

$$= \frac{\delta(r-r')\delta(\theta-\theta')\delta(\phi-\phi')}{r^2\sin\theta} \tag{8.28}$$

と表される。

円筒座標表示 $\boldsymbol{r}=(\rho,\phi,z)$

$$x = \rho\cos\phi,\ \ y = \rho\sin\phi,\ \ z, \tag{8.29}$$

$$\rho = \sqrt{x^2+y^2},\ \ \tan\phi = \frac{y}{x} \tag{8.30}$$

を用いると、3次元デルタ関数は

$$\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}') = \frac{\delta(\rho-\rho')\delta(\phi-\phi')\delta(z-z')}{\rho} \tag{8.31}$$

と表される。

3次元デルタ関数の使用例；

$$\nabla^2(\frac{1}{r}) = -4\pi\delta(\boldsymbol{r}),\ (r \equiv \sqrt{x^2+y^2+z^2}). \tag{8.32}$$

9　フーリエ変換

9.1　1次元フーリエ変換

与えられた関数 $f(x)$ に対して次式でフーリエ変換 $F(k)$ を定義する。

$$F(k) \equiv \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\mathrm{e}^{-ikx}dx. \tag{9.1}$$

$F(k)$ の逆フーリエ変換 $f(x)$ はデルタ関数の性質を用いて求められる。

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} F(k)\mathrm{e}^{ikx}dk = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}[\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{e}^{ik(x'-x)}f(x')dk]dx' = f(x). \tag{9.2}$$

上述の定義では、因子 $1/\sqrt{2\pi}$ をフーリエ変換、逆変換にそれぞれつけたが、因子 $1/(2\pi)$ をどちらか一方につけている定義もあるので、注意すべきである。

適用例：

$$\text{Gauss 型関数} \qquad f(x) = \exp(-\frac{x^2}{\sigma^2}) \tag{9.3}$$

$$F(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\mathrm{e}^{-ikx}dx \tag{9.4}$$

$$= \frac{\sigma}{\sqrt{2}}\exp(-\frac{\sigma^2 k^2}{4}). \tag{9.5}$$

9.2 3次元フーリエ変換

3次元においても、3次元デルタ関数の性質を用いて、与えられた関数 $f(\boldsymbol{r})$ に対して次式でフーリエ変換 $F(\boldsymbol{k})$ とその逆変換を考えることができる。

$$F(\boldsymbol{k}) \equiv \frac{1}{(\sqrt{2\pi})^3}\iiint f(\boldsymbol{r})\mathrm{e}^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}d^3\boldsymbol{r}, \tag{9.6}$$

$$= \frac{1}{(\sqrt{2\pi})^3}\iiint f(x,y,z)\mathrm{e}^{-i(xk_x+yk_y+zk_z)}dxdydz \tag{9.7}$$

$$f(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{(\sqrt{2\pi})^3}\iiint F(\boldsymbol{k})\mathrm{e}^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}d^3\boldsymbol{k} \tag{9.8}$$

(9.9)

10　特殊関数

特殊関数の数値計算は、通常、変数の値が小さいときは、原点付近の変数についての関数の級数展開を、変数の値が大きいときは関数の漸近形か漸近級数展開を利用して行う。ただし、級数展開は、発散する級数であり変数の値が十分大きいときには、級数の初めの数項で近似値を得るというものであり、使用する場合には十分な注意が必要である。エルミート関数、ラゲール関数などでは添え字が整数の場合、添え字についての漸化式を利用する。つまり、ある添え字の値に対する関数値だけを級数展開などで求めて、その他の関数値は添え字の値を ± 1 ずつ順次変化させて求める。ただし、漸化式を繰り返すことにより、関数の絶対値が順次小さくなるときは計算精度が悪くなる。また絶対値が急速に発散するときも注意が必要である。[9]

10.1　ガンマ関数

定義と性質

$$\Gamma(x) = \int_0^\infty \mathrm{e}^{-t}\, t^{x-1}\, dt, \tag{10.1}$$

$$\Gamma(x+1) = x\,\Gamma(x), \tag{10.2}$$

$$\Gamma(x)\,\Gamma(1-x) = \frac{\pi}{\sin(\pi x)}, \tag{10.3}$$

$$\Gamma(x+\frac{1}{2})\,\Gamma(\frac{1}{2}-x) = \frac{\pi}{\cos(\pi x)}, \tag{10.4}$$

$$\Gamma(2x) = \frac{2^{2x}}{2\sqrt{\pi}}\Gamma(x)\,\Gamma(\frac{1}{2}+x). \tag{10.5}$$

具体的表現

$$\Gamma(1) = 1,\ \ \Gamma(2) = 1,\ \ \Gamma(3) = 2,\ \ \cdots\ \ \Gamma(n+1) = n!. \tag{10.6}$$

$$\Gamma(1/2) = \sqrt{\pi},\ \ \Gamma(3/2) = \frac{\sqrt{\pi}}{2},\ \ \Gamma(5/2) = \frac{3\sqrt{\pi}}{4},\ \ \cdots \tag{10.7}$$

$$\Gamma(n+1/2) = \frac{(2n-1)!!}{2^n}\sqrt{\pi} = \frac{(2n)!}{2^{2n}\cdot n!}\sqrt{\pi}. \tag{10.8}$$

10.2　エルミート多項式（Hermite polynomial）

調和振動子の量子力学的な取り扱いの際に使用される。エルミート多項式には種々の定義があり、注意を要する。

1. Schiff 教科書他
   物理関係 ([5, 6, 7, 8, 9, 13]) ではこの定義が使用されていることが多い。

$$微分方程式: (\frac{d^2}{dx^2} - 2x\frac{d}{dx} + 2n)H_n(x) = 0, \tag{10.9}$$

関数表示: $H_n(x) = (-1)^n \mathrm{e}^{x^2} \dfrac{d^n}{dx^n} \mathrm{e}^{-x^2}, \quad (10.10)$

実例 : $H_0(x) = 1, \quad (10.11)$

$H_1(x) = 2x, \quad (10.12)$

$H_2(x) = 4x^2 - 2, \quad (10.13)$

$H_3(x) = 8x^3 - 12x, \quad (10.14)$

$H_4(x) = 16x^4 - 48x^2 + 12, \quad (10.15)$

$H_5(x) = 42x^5 - 160x^3 + 120x, \quad (10.16)$

漸近公式 : $H_n(x) \approx 2^n x^n, (\mathrm{as}\, x \to \infty), \quad (10.17)$

母関数 : $\mathrm{e}^{2tx - t^2} = \displaystyle\sum_{n=0}^{\infty} H_n(x) \frac{t^n}{n!}, \quad (10.18)$

漸化式: $H_{n+1}(x) = 2xH_n(x) - 2nH_{n-1}, \quad (10.19)$

$\dfrac{d}{dx} H_n(x) = 2nH_{n-1}(x), \quad (10.20)$

直交関係: $\displaystyle\int_{-\infty}^{\infty} H_n(x) H_{n'} \mathrm{e}^{-x^2} dx = \delta_{nn'} \cdot 2^n \cdot n! \sqrt{\pi}, \quad (10.21)$

空間反転性 : $H_n(-x) = (-1)^n H_n(x). \quad (10.22)$

2. 岩波公式集 III[4]

微分方程式: $(\dfrac{d^2}{dx^2} - x \dfrac{d}{dx} + n) H_n(x) = 0, \quad (10.23)$

関数表示: $H_n(x) = (-1)^n \mathrm{e}^{x^2/2} \dfrac{d^n}{dx^n} \mathrm{e}^{-x^2/2}, \quad (10.24)$

実例 : $H_0(x) = 1, \quad (10.25)$

$H_1(x) = x, \quad (10.26)$

$H_2(x) = x^2 - 1, \quad (10.27)$

$H_3(x) = x^3 - 3x, \quad (10.28)$

$H_4(x) = x^4 - 6x^2 + 3, \quad (10.29)$

$H_5(x) = x^5 - 10x^3 + 15x, \quad (10.30)$

特別な値 : $H_{2n}(0) = (-1)^n (2n-1)!!, \quad (10.31)$

$H_{2n+1}(0) = 0, \quad (10.32)$

$H'_{2n+1}(0) = (-1)^n (2n+1)!!, \quad (10.33)$

母関数 : $\mathrm{e}^{tx - t^2/2} = \displaystyle\sum_{n=0}^{\infty} H_n(x) \frac{t^n}{n!}, \quad (10.34)$

漸化式 1 : $H_{n+1}(x) = xH_n(x) - nH_{n-1}, \quad (10.35)$

漸化式 2 : $\dfrac{d}{dx} H_n(x) = nH_{n-1}(x), \quad (10.36)$

直交関係: $\displaystyle\int_{-\infty}^{\infty} H_n(x) H_{n'} \mathrm{e}^{-x^2/2} dx = \delta_{nn'} n! \sqrt{2\pi}. \quad (10.37)$

10.3 ラゲール多項式および陪多項式（associated Laguerre polynomial)

水素原子や 2、3 次元調和振動子の量子力学取り扱い、特に動径方向の波動関数を記述する際に使用される。エルミート多項式と同様に、いくつかの定義があることに注意すべきである。

1. Schiff 教科書 [5]

(a) ラゲール多項式

$$\text{母関数 } 1: \frac{\mathrm{e}^{-tx/(1-t)}}{(1-t)} = \sum_{n=0}^{\infty} L_n(x)\frac{t^n}{n!}, \tag{10.38}$$

$$\text{微分方程式}: [x\frac{d^2}{dx^2} + (1-x)\frac{d}{dx} + n]L_n(x) = 0, \tag{10.39}$$

$$\text{漸化式 } 1: L_{n+1}(x) = (2n+1-x)L_n(x) - n^2 L_{n-1}(x), \tag{10.40}$$

$$\text{漸化式 } 2: \frac{d}{dx}L_n(x) - n\frac{d}{dx}L_{n-1}(x) = -nL_{n-1}(x), \tag{10.41}$$

$$\tag{10.42}$$

(b) ラゲール陪多項式

$$\text{関数表示}: L_n^\alpha(x) \equiv \frac{d^\alpha}{dx^\alpha}L_n(x), \tag{10.43}$$

$$\text{微分方程式}: [x\frac{d^2}{dx^2} + (\alpha+1-x)\frac{d}{dx} + (n-\alpha)]L_n^\alpha(x) = 0, \tag{10.44}$$

$$\text{母関数}: \frac{(-t)^\alpha \mathrm{e}^{-tx/(1-t)}}{(1-t)^{\alpha+1}} = \sum_{n=\alpha}^{\infty} L_n^\alpha(x)\frac{t^n}{n!}, \tag{10.45}$$

$$\text{直交規格性}: \int_0^\infty x^\alpha \mathrm{e}^{-x} L_m^\alpha(x) L_n^\alpha(x) dx = \delta_{mn}\frac{(n!)^3}{(n-\alpha)!} \tag{10.46}$$

2. 岩波公式 III[4], 岡部 [9]

(a) ラゲール多項式

$$L_n(x) \equiv L_n^{\alpha=0}(x). \tag{10.47}$$

(b) ラゲール陪多項式

$$\text{微分方程式}: [x\frac{d^2}{dx^2} + (\alpha+1-x)\frac{d}{dx} + n]L_n^\alpha(x) = 0, \tag{10.48}$$

$$\text{実例}: L_0^\alpha(x) = 1, \tag{10.49}$$

$$L_1^\alpha(x) = (\alpha+1) - x, \tag{10.50}$$

$$L_2^\alpha(x) = \frac{x^2}{2} - (\alpha+2)x + \frac{1}{2}(\alpha+1)(\alpha+2) \tag{10.51}$$

$$L_n^{-n}(x) = (-1)^n\frac{x^n}{n!}, \tag{10.52}$$

$$\text{母関数}: \frac{\exp(-\frac{tx}{1-t})}{(1-t)^{\alpha+1}} = \sum_{n=0}^{\infty} L_n^\alpha(x)t^n, \tag{10.53}$$

$$\text{漸化式 } 1: nL_n^\alpha(x) + (x-2n-\alpha+1)L_{n-1}^\alpha(x) \tag{10.54}$$

$$+(n+\alpha-1)L_{n-2}^\alpha(x) = 0, \tag{10.55}$$

$$\text{漸化式 2：}x\frac{d}{dx}L_n^\alpha(x) = nL_n^\alpha(x) - (n+\alpha)L_{n-1}^\alpha(x), \tag{10.56}$$

$$\text{直交関係:}\int_0^\infty L_n^\alpha(x)L_{n'}^\alpha \mathrm{e}^{-x}x^\alpha dx = \delta_{nn'}\frac{(\alpha+n)!}{n!}, \tag{10.57}$$

3. Morse and H. Feshbach[1]

(a) ラゲール多項式

(b) ラゲール陪多項式

$$\text{関数表示: }L_n^\alpha(x) = \frac{(n+\alpha)!}{n!}\frac{\mathrm{e}^x}{x^\alpha}\frac{d^n}{dx^n}(x^{n+\alpha}\mathrm{e}^{-x}), \tag{10.58}$$

$$\text{微分方程式: }[x\frac{d^2}{dx^2} + (\alpha+1-x)\frac{d}{dx} + n]L_n^\alpha(x) = 0, \tag{10.59}$$

$$\text{母関数 : }\frac{\exp(-\frac{tx}{1-t})}{(1-t)^{\alpha+1}} = \sum_{n=0}^\infty \frac{L_n^\alpha(x)}{(n+\alpha)!}t^n, \tag{10.60}$$

$$\text{漸化式 1：}(x-\alpha-2n-1)L_n^\alpha(x) = -\frac{(n+1)}{(\alpha+n+1)}L_{n+1}^\alpha(x) - (\alpha+n)^2 L_{n-1}^\alpha(x) \tag{10.61}$$

$$\text{漸化式 2：}x\frac{d}{dx}L_n^\alpha(x) = (x-\alpha)L_n^\alpha(x) + (n+1)L_{n+1}^{\alpha-1}(x), \tag{10.62}$$

$$\text{直交規格性 : }\int_0^\infty x^\alpha \mathrm{e}^{-x}L_m^\alpha(x)L_n^\alpha(x)dx = \delta_{mn}\frac{[(n+\alpha)!]^3}{n!} \tag{10.63}$$

10.4 ルジャンドル多項式または関数（Legendre polynomial）

$$\text{微分方程式: }[(1-x^2)\frac{d^2}{dx^2} - 2x\frac{d}{dx} + \ell(\ell+1)]P_\ell(x) = 0, \tag{10.64}$$

$$\text{関数表示: }P_\ell(x) = \frac{1}{2^\ell \ell!}\frac{d^\ell}{dx^\ell}(x^2-1)^\ell, \tag{10.65}$$

$$\text{実例 : }P_0(x) = 1, \tag{10.66}$$

$$P_1(x) = x, \tag{10.67}$$

$$P_2(x) = \frac{1}{2}(3x^2-1), \tag{10.68}$$

$$P_3(x) = \frac{1}{2}(5x^3-x), \tag{10.69}$$

$$P_4(x) = \frac{1}{8}(35x^4-30x^2+3), \tag{10.70}$$

$$P_{2\ell}(0) = (-1)^\ell\frac{(2\ell)!}{2^{2\ell}(\ell!)^2}, \tag{10.71}$$

$$P_{2\ell+1}(0) = 0, \tag{10.72}$$

$$P_\ell(1) = 1, \tag{10.73}$$

$$P_\ell(-1) = (-1)^\ell, \tag{10.74}$$

$$\text{漸化式 1 : }\ell P_\ell(x) = (2\ell-1)xP_{\ell-1}(x) - (\ell-1)P_{\ell-2}, \tag{10.75}$$

漸化式 2 : $(x^2-1)\frac{d}{dx}P_\ell(x) = \ell[xP_\ell(x) - P_{\ell-1}(x)],$ (10.76)

$$= \frac{\ell(\ell+1)}{2\ell+1}[P_{\ell+1}(x) - P_\ell(x)], \quad (10.77)$$

$$= (\ell+1)[P_{\ell+1}(x) - xP_\ell(x)], \quad (10.78)$$

直交関係 1：$\int_{-1}^{1} P_\ell(x)P_{\ell'}dx = \delta_{\ell\ell'}\frac{2}{2\ell+1},$ (10.79)

直交関係 2：$\int_{-1}^{1} x^k P_\ell(x)dx = 0 \quad \text{for } k = 0, 1, 2, \cdots, \ell-1.$ (10.80)

10.5 ルジャンドル陪多項式または関数（Legendre associated polynomial）

10.6 球面調和関数（spherical harmonics）

$$Y_{\ell m}(\theta,\phi) \equiv (-1)^{\frac{m+|m|}{2}}\sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}\frac{(\ell-|m|)!}{(\ell+|m|)!}} \cdot P_\ell^{|m|}(\cos\theta)\cdot \mathrm{e}^{im\phi} \quad (10.81)$$

ここで $P_\ell^{|m|}(\cos\theta)$ はルジャンドル陪多項式である。
直交規格性：

$$\int_0^\pi \sin\theta d\theta \int_0^{2\pi} d\phi\, Y^*_{\ell m}(\theta,\phi)\, Y_{\ell' m'}(\theta,\phi) = \delta_{\ell\ell'}\delta_{mm'}. \quad (10.82)$$

具体例:

$$Y_{00}(\theta,\phi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}, \quad (10.83)$$

$$Y_{1,+1}(\theta,\phi) = -\frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{2\pi}}\sin\theta \mathrm{e}^{i\phi}, \quad (10.84)$$

$$Y_{1,0}(\theta,\phi) = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{\pi}}\cos\theta, \quad (10.85)$$

$$Y_{1,-1}(\theta,\phi) = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{2\pi}}\sin\theta \mathrm{e}^{-i\phi}, \quad (10.86)$$

$$Y_{2,+2}(\theta,\phi) = \frac{1}{4}\sqrt{\frac{3\cdot 5}{2\pi}}\sin^2\theta \mathrm{e}^{i2\phi} = \frac{1}{8}\sqrt{\frac{3\cdot 5}{2\pi}}(1-\cos 2\theta)\mathrm{e}^{i2\phi}, \quad (10.87)$$

$$Y_{2,+1}(\theta,\phi) = -\frac{1}{2}\sqrt{\frac{3\cdot 5}{2\pi}}\cos\theta\sin\theta \mathrm{e}^{i\phi} = -\frac{1}{4}\sqrt{\frac{3\cdot 5}{2\pi}}\sin 2\theta \mathrm{e}^{i\phi}, \quad (10.88)$$

$$Y_{2,0}(\theta,\phi) = \frac{1}{4}\sqrt{\frac{5}{\pi}}(3\cos^2\theta - 1) = \frac{1}{8}\sqrt{\frac{5}{\pi}}(1+3\cos 2\theta), \quad (10.89)$$

$$Y_{2,-1}(\theta,\phi) = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{3\cdot 5}{2\pi}}\cos\theta\sin\theta \mathrm{e}^{-i\phi} = \frac{1}{4}\sqrt{\frac{3\cdot 5}{2\pi}}\sin 2\theta \mathrm{e}^{-i\phi}, \quad (10.90)$$

$$Y_{2,-2}(\theta,\phi) = \frac{1}{4}\sqrt{\frac{3\cdot 5}{2\pi}}\sin^2\theta \mathrm{e}^{-i2\phi} = \frac{1}{8}\sqrt{\frac{3\cdot 5}{2\pi}}(1-\cos 2\theta)\mathrm{e}^{-i2\phi}, \quad (10.91)$$

(10.92)

特殊な値

$$Y_{\ell m}(0,0) = \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}}\delta_{m0}, \tag{10.93}$$

$$Y_{\ell m}(0,\phi) = \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}}\delta_{m0}. \tag{10.94}$$

10.7　ベッセル関数と変形ベッセル関数 [4]

10.7.1　ベッセル関数

次の微分方程式をベッセルの微分方程式という。

$$\frac{1}{z}\frac{d}{dz}(z\frac{du}{dz}) + (1-\frac{\nu^2}{z^2})u = \frac{d^2u}{dz^2} + \frac{1}{z}\frac{du}{dz} + (1-\frac{\nu^2}{z^2})u = 0. \tag{10.95}$$

この微分方程式の解は（狭義の）ベッセル関数（または第１種円柱関数）$J_\nu(z)$, ノイマン関数（または第２種円柱関数）$N_\nu(z)$, 第１種ハンケル関数 $H_\nu^{(1)}(z)$, 第２種ハンケル関数 $H_\nu^{(2)}(z)$ が知られている。このうち、$H_\nu^{(1)}(z)$,$H_\nu^{(2)}(z)$ をまとめてハンケル関数（または第３種円柱関数）という。

$$\text{ベッセル関数} : J_\nu(z) = (\frac{z}{2})^\nu \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n(\frac{z}{2})^{2n}}{n!\Gamma(\nu+n+1)}, \ (z \neq \text{負の実数}) \tag{10.96}$$

$$\text{ノイマン関数} : N_\nu(z) = Y_\nu(z) = \frac{\cos\nu\pi J_\nu(z) - J_{\nu-1}(z)}{\sin\nu\pi} \tag{10.97}$$

$$\text{特殊な場合} : J_{-n}(z) = (-1)^n J_n(z),\ N_{-n}(z) = (-1)^n N_n(z), (\text{整数の } n) \tag{10.98}$$

$$\begin{aligned} \text{漸近級数} : J_\nu(z) &= \sqrt{\frac{2}{z\pi}}\{P(z)\cos[z-\frac{(2\nu+1)\pi}{4}] \\ &\quad -Q(z)\sin[z-\frac{(2\nu+1)\pi}{4}]\} & (10.99) \\ &= \sum_{k=0}^{\infty} t_k\ \cos(\frac{k\pi}{2} - z + \frac{\nu\pi}{2} + \frac{\pi}{4}), & (10.100) \end{aligned}$$

$$P(z) \equiv 1 + \sum_{k=1}^{\infty}(-1)^k \frac{(4\nu^2-1^2)(4\nu^2-3^2)\cdots(4\nu^2-(4k-1)^2)}{(2k)!(8z)^{2k}}$$

$$Q(z) \equiv \sum_{k=1}^{\infty}(-1)^k \frac{(4\nu^2-1^2)(4\nu^2-3^2)\cdots(4\nu^2-(4k+1)^2)}{(2k+1)!(8z)^{2k+1}}$$

$$t_k = \frac{(k-\frac{1}{2})^2 - \nu^2}{2kz} t_{k-1}, t_0 = \sqrt{\frac{2}{z\pi}} \tag{10.101}$$

数値を求める場合、z が $7.5 + 0.3|\nu|$ より小さい時は、（10.96）式をそれより大きい時は（10.101）式を使うとよい。[9]

10.7.2　変形ベッセル関数

次の微分方程式を変形ベッセル微分方程式という。

$$\frac{1}{z}\frac{d}{dz}(z\frac{du}{dz}) - (1+\frac{\nu^2}{z^2})u = \frac{d^2u}{dz^2} + \frac{1}{z}\frac{du}{dz} - (1+\frac{\nu^2}{z^2})u = 0. \tag{10.102}$$

$$
\begin{aligned}
I_\nu(z) &= \mathrm{e}^{-\nu\pi i/2} J_\nu(iz)\ (-\pi < \arg \mathrm{z} < \pi/2) && (10.103)\\
&= \mathrm{e}^{3\nu\pi i/2} J_\nu(iz)\ (\pi/2 < \arg \mathrm{z} < \pi) && (10.104)\\
&= (\frac{z}{2}) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(z/2)^{2n}}{n!\Gamma(\nu+n+1)}\ [z \neq \text{負の実数}] && (10.105)
\end{aligned}
$$

11　演算子代数

11.1　演算子の関数と交換関係の定義

任意の演算子を A, B, C とする。演算子の関数を次のように定義する。である。二つの演算子 A, B の積 AB は被作用関数 Ψ に対して

$$(AB)\Psi = A(B\Psi) \tag{11.1}$$

で定義される。左辺は演算子の積 AB を波動関数 Ψ に作用させて得られる新しい関数、右辺はまず B を作用させて得られる別の関数 $B\Psi \equiv \chi$ に、さらに A を作用させて得られる関数 $A\chi$ を意味する。

同じ演算子に繰り返しの場合には

$$AA = A^2, AAA = A^3, \cdots \tag{11.2}$$

のように書く。

以上のように演算子の積を定義すれば、演算子 A の関数 $f(A)$ もまた、演算子とみなすことができる。古典的な変数 x の関数 $f(x)$ はある展開係数 $\{c_n; n = 0, 1, 2, \cdots, \infty\}$ を用いてテーラー展開される。

$$f(x) = c_0 + c_1 x + c_2 x^2 + \cdots = \sum_{n=0}^{\infty} c_n x^n. \tag{11.3}$$

演算子 A を変数とする関数 $f(A)$ も演算子となる。

$$f(A) = c_0 + c_1 A + c_2 A^2 + \cdots = \sum_{n=0}^{\infty} c_n A^n. \tag{11.4}$$

例えば、演算子 A の指数関数は

$$\mathrm{e}^A = 1 + A + \frac{1}{2!}A^2 + \cdots = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!}A^n \tag{11.5}$$

と表される。

次の式で交換関係（交換子、commutator）を定義する：

$$[A, B] \equiv AB - BA. \tag{11.6}$$

一般には、<u>演算子の積の順序は一般に非可換である</u>。すなわち、演算子 A, B の積の順序を交換すると（複合）演算子としては異なる効果をもたらす。この事実は数学的には交換関係がゼロではないとして表現される

11.2　演算子代数の公式

2 つの演算子

11.2.1　演算子の交換関係

演算子 A, B, C の交換関係

11.2.2 演算子の関数の定義

11.2.3 演算子の指数関数の公式

以下の公式が成立する。

$$
\begin{aligned}
\mathrm{e}^{-A}B\mathrm{e}^{A} &= B+[B,A]+\frac{1}{2!}[[B,A],A]+\frac{1}{3!}[[[B,A],A],A]+\cdots, &(11.7)\\
\mathrm{e}^{A}B\mathrm{e}^{-A} &= B+[A,B]+\frac{1}{2!}[A,[A,B]]+\frac{1}{3!}[A,[A,[A,B]]]+\cdots. &(11.8)
\end{aligned}
$$

if $[[A,B],A]=[[A,B],B]=0$

$$
\begin{aligned}
\mathrm{e}^{A+B} &= \mathrm{e}^{A}\mathrm{e}^{B}\mathrm{e}^{-[A,B]/2}, &(11.9)\\
&= \mathrm{e}^{B}\mathrm{e}^{A}\mathrm{e}^{[A,B]/2} &(11.10)
\end{aligned}
$$

ハウスドルフ（Campbell-Hausdorf）の公式

演算子 X,Y に対して

$$\log[\mathrm{e}^{X}\mathrm{e}^{Y}]=(X+Y)+\frac{1}{2}[X,Y]+\frac{1}{12}\left([X,[X,Y]]+[Y,[Y,X]]\right)+\cdots \quad (11.11)$$

が成立する。使用例

$$
\begin{aligned}
\mathrm{e}^{A+B+C} &= \mathrm{e}^{A}\mathrm{e}^{Z}(\text{因数分解}), &(11.12)\\
Z &\equiv (B+C)-\frac{1}{2}[A,B+C]-\frac{1}{12}[[A,B+C],2A+B+C]+\cdots
\end{aligned}
$$

参考文献

[1] P.M. Morse and H. Feshbach, Method of Theoretical Physics, McGraw-Hill, 1953,vol.I.

[2] 森口、宇田川, 一松、 岩波数学公式 I, 岩波書店.

[3] 森口、宇田川, 一松、 岩波数学公式 II, 岩波書店.

[4] 森口、宇田川, 一松、岩波数学公式 III, 岩波書店.

[5] L.I. Schiff,*Quantum Mechanics*,third edition, McGraw Hill,1968,pp.69-71.

[6] 小谷正雄、梅沢博臣、「大学演習量子力学」、裳華房、1992 年

[7] 小出昭一郎、「量子力学（I）」、裳華房、1984 年、p.42.

[8] 岡崎　誠、「量子力学（改訂版）」、サイエンス社、1984 年、pp.49-50.

[9] 岡部成玄、「量子論　運動と方法」、近代科学社、1992 年。

[10] 田中　一、「量子力学」、近代科学社、1992 年。

[11] 有馬朗人、「量子力学」、朝倉書店、1984 年、pp.49-50.

[12] 原田義也、「量子化学」、裳華房、1984 年、p.103.

[13] J. Schwinger,*Quantum Mechanics*, Springer,2001,pp.118-119.