量子力学にでてくる 3 つの特殊関数

タイトルどおり，量子力学を勉強すると比較的早い時期にでくわす特殊関数**Legendre**(ルジャンドル)**多項式**(たこうしき)，**Laguerre**(ラゲール)**多項式**(たこうしき)，**Hermite**(エルミート)**多項式**(たこうしき)についてまとめた[*1]。導出などは一切書いていない。まずは，この頁で 3 つの注意を示し，次頁以降で 3 つの特殊函数について簡潔にまとめた。

母関数　x と y の関数 $f(x,y)$ を y について展開して，$f(x,y)=\sum g_n(x)y^n$ のように書くことができる場合，y^n の係数として $g_n(x)$ という関数が定義される。このとき，$f(x,y)$ を関数列 $\{g_n(x)\}$ の**母関数**(ぼかんすう)という。

Gauss の記号　和の上限を $\sum_{k=0}^{[n/2]}$ のように書くことがある。ここで，$[*]$ は，$*$ を越えない最大の整数を表す。これを**Gauss**(ガウス)**の記号**(きごう)とよぶ。

Laguerre の多項式　Laguerre の多項式，陪多項式(ばいたこうしき)は教科書によって定義が異なるから，注意が必要である。具体的には，Laguerre の多項式の定義は次の 2 通りある。

$$L_m(x)=e^{-x}\frac{\mathrm{d}^m}{\mathrm{d}x^k}(x^me^{-x}) \tag{1}$$

$$L_{m\ (\text{公式})}(x)=\frac{e^{-x}}{m!}\frac{\mathrm{d}^m}{\mathrm{d}x^k}(x^me^{-x}) \tag{2}$$

このプリントでは上の定義を用いた[*2]。これらには次の関係がある[*3]。

$$L_m(x)=L_{m\ (\text{公式})}(x)\times m! \tag{3}$$

また，Laguerre の陪多項式間には次の関係がある[*4]。

$$L_m^k(x)=(-1)^k m! L^k_{m-k\ (\text{公式})}(x) \tag{4}$$

[*1] もちろん，ここに示した以外にも（Bessel(ベッセル)関数，Tchebycheff(チェビシェフ)関数，δ(デルタ) 関数などなど）多くの特殊関数が量子力学にでてくる。

[*2] 脚注*3 の文献やアルフケン（特殊関数と積分方程式，講談社）などでは下の定義を用いている。類家の手元にあるテキストを見るかぎり，こちらの方が多い。(2) 式の下付き「(公式)」は，脚注*3 の文献でこのように定義していることを示す。

[*3] 森口，宇田川，一松，数学公式 III– 特殊函数 –，97 頁，岩波

[*4] 山形正男，量子力学，229 頁，裳華房

1 Legendre の多項式 $P_\ell(x)$ と陪多項式 $P_\ell^m(x)$

1.1 Legendre の多項式：$P_\ell(x), \ell = 0, 1, 2, \cdots$

量子力学との関係　ここで示した ℓ は，そのまま方位量子数だと思ってよい。

1.1.1 微分方程式

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left((1-x^2)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}P_\ell(x)\right) + \ell(\ell+1)P_\ell(x) = 0 \tag{5}$$

1.1.2 母関数による定義

$$\frac{1}{\sqrt{1-2xt+t^2}} = \sum_{\ell=0}^{\infty} P_\ell(x)t^\ell \tag{6}$$

1.1.3 Rodrigues の公式

$$P_\ell(x) = \frac{1}{2^\ell \ell!}\frac{\mathrm{d}^\ell}{\mathrm{d}x^\ell}\left(x^2-1\right)^\ell \tag{7}$$

1.1.4 あらわな式

$$P_\ell(x) = \frac{1}{2^\ell}\sum_{k=0}^{[\ell/2]} \frac{(-1)^k(2\ell-2k)!}{k!(\ell-k)!(\ell-2k)!}x^{\ell-2k} \tag{8}$$

1.1.5 三項漸化式

$$(\ell+1)P_{\ell+1}(x) - (2\ell+1)xP_\ell(x) + \ell P_{\ell-1}(x) = 0 \quad \text{ただし，} \ell \geq 1 \tag{9}$$

1.1.6 具体例

$$P_0(x) = 1 \tag{10}$$

$$P_1(x) = x \tag{11}$$

$$P_2(x) = \frac{3x^2-1}{2} \tag{12}$$

$$P_3(x) = \frac{5x^3-3x}{2} \tag{13}$$

$$P_4(x) = \frac{35x^4-30x^2+3}{8} \tag{14}$$

1.2 Legendre の陪多項式

量子力学との関係　ここで示した ℓ と m は，そのまま方位量子数，磁気量子数だと思ってよい。

1.2.1 微分方程式

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left((1-x^2)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}P_\ell^m(x)\right)-\frac{m^2}{1-x^2}P_\ell^m(x)+\ell(\ell+1)P_\ell^m(x)=0 \tag{15}$$

1.2.2 Legendre の多項式との関係

$$P_\ell^m(x)=(1-x^2)^{|m|/2}\frac{\mathrm{d}^{|m|}}{\mathrm{d}x^{|m|}}P_\ell(x) \tag{16}$$

1.2.3 Rodrigues の公式

$$P_\ell^m(x)=\frac{1}{2^\ell \ell!}(1-x^2)^{|m|/2}\frac{\mathrm{d}^{\ell+|m|}}{\mathrm{d}x^{\ell+|m|}}\left(x^2-1\right)^\ell \tag{17}$$

1.2.4 母関数による定義

$$\frac{(2m)!(1-x^2)^{m/2}t^m}{2^m m!(1-2tx+t^2)^{m+1/2}}=\sum_{\ell=m}^{\infty}P_\ell^m(x)t^\ell \tag{18}$$

1.2.5 あらわな式

$$P_\ell^m(x)=\frac{(1-x^2)^{m/2}}{2^\ell}\sum_{k=0}^{[(\ell-m)/2]}\frac{(-1)^k(2\ell-2k)!}{k!(\ell-k)!(\ell-2k-m)!}x^{\ell-2k-m} \tag{19}$$

1.2.6 三項漸化式

$$P_\ell^{m+1}-\frac{2mx}{\sqrt{1-x^2}}P_\ell^m+\left[\ell(\ell+1)-m(m-1)\right]P_\ell^{m-1}=0 \tag{20}$$

$$(2\ell+1)xP_\ell^m=(\ell+m)P_{\ell-1}^m+(\ell-m+1)P_{\ell+1}^m \tag{21}$$

1.2.7 具体例

$$P_0^0(x)=1 \tag{22}$$

$$P_1^0(x)=x \tag{23}$$

$$P_1^1(x)=\sqrt{1-x^2} \tag{24}$$

$$P_2^0(x)=\frac{3x^2-1}{2} \tag{25}$$

$$P_2^1(x)=3x\sqrt{1-x^2} \tag{26}$$

$$P_2^2(x)=3(1-x^2) \tag{27}$$

$$P_3^0(x)=\frac{5x^3-3x}{2} \tag{28}$$

$$P_3^1(x)=\frac{3\sqrt{1-x^2}(5x^2-1)}{2} \tag{29}$$

$$P_3^2(x)=15(1-x^2)x \tag{30}$$

$$P_3^3(x)=15(1-x^2)^{3/2} \tag{31}$$

2 Laguerre の多項式 $L_m(x)$ と陪多項式 $L_m^k(x)$

2.1 Laguerre の多項式：$L_m(x), m = 0, 1, 2, \cdots$

量子力学との関係　ここで示した m は磁気量子数ではない。主量子数と方位量子数の和 $n + \ell$ に相当する[*5]。

2.1.1 微分方程式

$$x\frac{\mathrm{d}^2 L_m(x)}{\mathrm{d}x^2} + (1 - x)\frac{\mathrm{d}L_m(x)}{\mathrm{d}x} + mL_m(x) = 0 \tag{32}$$

2.1.2 母関数による定義

$$\frac{1}{1-t}\exp\left(-\frac{xt}{1-t}\right) = \sum_{m=0}^{\infty} L_m(x)\frac{t^m}{m!} \tag{33}$$

2.1.3 Rodrigues の公式

$$L_m(x) = e^x \frac{\mathrm{d}^m}{\mathrm{d}x^m}\left(x^m e^{-x}\right) \tag{34}$$

2.1.4 あらわな式

$$L_m(x) = \sum_{r=0}^{m}(-1)^r \frac{(m!)^2}{(r!)^2(m-r)!}x^r \tag{35}$$

2.1.5 三項漸化式

$$L_{m+1}(x) = (2m + 1 - x)L_m(x) - m^2 L_{m-1}(x) \tag{36}$$

2.1.6 具体例

$$L_0(x) = 1 \tag{37}$$
$$L_1(x) = -x + 1 \tag{38}$$
$$L_2(x) = x^2 - 4x + 2 \tag{39}$$
$$L_3(x) = -x^3 + 9x^2 - 18x + 6 \tag{40}$$
$$L_4(x) = x^4 - 16x^3 + 72x^2 - 96x + 24 \tag{41}$$
$$L_5(x) = -x^5 + 25x^4 - 200x^3 + 600x^2 - 600x + 120 \tag{42}$$
$$L_6(x) = x^6 - 36x^5 + 450x^4 - 2400x^3 + 5400x^2 - 4320x + 720 \tag{43}$$

[*5] 電子軌道の動径部分を表すラゲールの陪多項式は，$L_{n+\ell}^{2\ell+1}(\rho)$ と表される。1s 軌道〜3d 軌道は量子数では $n = 1, 2, 3$ と $\ell = 0, 1, 2$ に相当する。この範囲で $n + \ell$ の最大値は $n + \ell = 3 + 2 = 5$ であるから，Laguerre の多項式は $L_5(x)$ ぐらいまで見ておけば良い。

2.2 Laguerre の陪多項式：$L_m^k(x), k = 0, 1, 2, \cdots, m$

量子力学との関係　ここで示した m は磁気量子数ではない。主量子数と方位量子数の和 $n + \ell$ に相当する。また，k は $2\ell + 1$ に相当する。

2.2.1 微分方程式

$$x\frac{\mathrm{d}^2 L_m^k(x)}{\mathrm{d}x^2} + (k + 1 - x)\frac{\mathrm{d}L_m^k(x)}{\mathrm{d}x} + (m - k)L_m^k(x) = 0 \tag{44}$$

2.2.2 Laguerre の多項式との関係

$$L_m^k(x) := \frac{\mathrm{d}^k}{\mathrm{d}x^k}L_m(x) \qquad k = 0, 1, 2, \cdots, m \tag{45}$$

2.2.3 Rodrigue の公式

$$L_m^k(x) = \frac{x^{-k}e^k}{m!}\frac{\mathrm{d}^m}{\mathrm{d}x^m}\left(x^{m+k}e^{-x}\right) \tag{46}$$

2.2.4 母関数による定義

$$\frac{(-1)^k t^k}{(1-t)^{k+1}}\exp\left(-\frac{xt}{1-t}\right) = \sum_{m=k}^{\infty} L_m^k(x)\frac{t^m}{m!} \tag{47}$$

2.2.5 あらわな式

$$L_m^k(x) = (-1)^k m! \sum_{r=0}^{m-k}(-1)^r \frac{m!}{(m-k-r)!(k+r)!r!}x^r \tag{48}$$

2.2.6 三項漸化式

$$(m + 1 - k)L_{m+1}^k(x) = (m + 1)(2m - k + 1 - x)L_m^k(x) - m^2(m + 1)L_{m-1}^k(x) \tag{49}$$

2.2.7 具体例

$$L_0^0(x) = 1 \tag{50}$$
$$L_1^0(x) = -x + 1 \tag{51}$$
$$L_1^1(x) = -1 \tag{52}$$
$$L_2^0(x) = x^2 - 4x + 2 \tag{53}$$
$$L_2^1(x) = 2x - 4 \tag{54}$$
$$L_2^2(x) = 2 \tag{55}$$
$$L_3^0(x) = -x^3 + 9x^2 - 18x + 6 \tag{56}$$
$$L_3^1(x) = -3x^2 + 18x - 18 \tag{57}$$
$$L_3^2(x) = -6x + 18 \tag{58}$$
$$L_3^3(x) = -6 \tag{59}$$

3 Hermite の多項式：$H_n(x), n = 0, 1, 2, \cdots$

3.0.1 微分方程式

$$\frac{\mathrm{d}^2 H_n(x)}{\mathrm{d}x^2} - 2x\frac{\mathrm{d}H_n(x)}{\mathrm{d}x} + 2nH_n(x) = 0 \tag{60}$$

3.0.2 母関数による定義

$$e^{2xt-t^2} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_n(x)}{n!} t^n \tag{61}$$

3.0.3 Rodrigues の公式

$$H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n} e^{-x^2} \tag{62}$$

3.0.4 あらわな式

$$H_n(x) = \sum_{k=0}^{[n/2]} \frac{(-1)^k n! (2x)^{n-2k}}{(n-2k)! k!} \tag{63}$$

3.0.5 三項漸化式

$$H_{n+1}(x) = 2xH_n(x) - 2nH_{n-1}(x) \tag{64}$$

3.0.6 具体例

$$H_0(x) = 1 \tag{65}$$
$$H_1(x) = 2x \tag{66}$$
$$H_2(x) = 4x^2 - 2 \tag{67}$$
$$H_3(x) = 8x^3 - 12x \tag{68}$$
$$H_4(x) = 16x^4 - 48x^2 + 12 \tag{69}$$
$$H_5(x) = 32x^5 - 160x^3 + 120x \tag{70}$$
$$\tag{71}$$

4　参考にした文献や WEB 上の記事

	出版されているテキスト								ネット上のテキスト		
	山形	前野	公式III	スピーゲル	演習	アルフケン	春日	原田	倉澤	中村	田中
1.1.1	227	274								9	
1.1.2	227		84						354	5	
1.1.3		278						107		7	
1.1.4					225	86,109			353	6	
1.1.5	227		83							8	
1.1.6		279				92		107	352		
1.2.1		274			289				355		
1.2.2	227		85						352	11	
1.2.3		278			332				352		
1.2.4				149		117			354		
1.2.5			131		332						
1.2.6			126		336	118			354		
1.2.7		279									
2.1.1		302						121			
2.1.2	229					196				18	
2.1.3		302		153				121		19	29
2.1.4	228					196				19	
2.1.5	229					196				18	30
2.1.6						197		121			
2.2.1	228							120			30
2.2.2		303						121			30
2.2.3					218	200					
2.2.4				155			182				29
2.2.5	228					199					29
2.2.6							185				29
2.2.7	228							121			
3.0.1	226				219				350		36
3.0.2	226			151		185			350	15	
3.0.3	226		92						350		
3.0.4					218	187			350	16	
3.0.5	226				235				350	17	
3.0.6	226					186			352	18	

山形　山形正男　量子力学（裳華房テキストシリーズ―物理学）裳華房

前野　前野昌弘　よくわかる量子力学　東京図書

公式 III　森口繁一，宇田川銈久，一松信，数学公式（特殊函数），岩波

スピーゲル　スピーゲル　数学公式数表ハンドブック　マグロウヒル

演習　後藤憲一他編　詳解　物理応用　数学演習　共立出版社

アルフケン　ジョージアルフケン　特殊関数と積分方程式　講談社

春日　春日龍郎，松田豊稔　近似と特殊関数　早稲田出版

原田　原田義也　量子化学（上）　裳華房

倉澤　倉澤治樹（千葉大学）　量子力学 http://homepage2.nifty.com/kurasawa/qm_a.pdf

中村　http://www.astr.tohoku.ac.jp/~nakasho/WebPage/note/specialfunction.pdf

田中　田中宏志（島根大学）http://www.phys.shimane-u.ac.jp/tanaka_lab/lecture/math1/math1.pdf