163 頁の (11.65) 式
Ritz の変分法の中で，次の式変形がわかりにくいようなので，補足説明する[1]。

$$a' = \frac{\partial}{\partial c_i^*}\left(\sum_{i,j=1}^{n} c_i^* c_j H_{ij}\right) = \sum_{j=1}^{n} c_j H_{ij} \tag{1}$$

$$b' = \frac{\partial}{\partial c_i^*}\left(\sum_{i,j=1}^{n} c_i^* c_j S_{ij}\right) = \sum_{j=1}^{n} c_j S_{ij} \tag{2}$$

(1) 式の H_{ij} を S_{ij} と書き換えれば (2) 式となるから（すなわち，全く等価だから），(1) 式の変形だけを示す。これには，括弧の中の二重和 $\sum_{i,j=1}^{n}$ を展開してしまうのがよい。

$$\sum_{i,j=1}^{n} c_i^* c_j H_{ij} = \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} c_i^* c_j H_{ij} \qquad \text{省略形をきちんと書いた} \tag{3}$$

$$= \sum_{i=1}^{n}\left(c_i^* c_1 H_{i1} + c_i^* c_2 H_{i2} + c_i^* c_3 H_{i3} + \cdots + c_i^* c_n H_{in}\right) \qquad \sum_{j}\text{を展開した} \tag{4}$$

次に，$\sum_{i}$ を展開する

$$= \quad c_1^* c_1 H_{11} + c_1^* c_2 H_{12} + c_1^* c_3 H_{13} + \cdots + c_1^* c_n H_{1n} \qquad i = 1 \tag{5}$$

$$+ \quad c_2^* c_1 H_{21} + c_2^* c_2 H_{22} + c_2^* c_3 H_{23} + \cdots + c_2^* c_n H_{2n} \qquad i = 2 \tag{6}$$

$$+ \quad c_3^* c_1 H_{31} + c_3^* c_2 H_{32} + c_3^* c_3 H_{33} + \cdots + c_3^* c_n H_{3n} \qquad i = 3 \tag{7}$$

$$\vdots$$

$$+ \quad c_n^* c_1 H_{n1} + c_n^* c_2 H_{n2} + c_n^* c_3 H_{n3} + \cdots + c_n^* c_n H_{nn} \qquad i = n \tag{8}$$

次に，$\frac{\partial}{\partial c_i^*}\left(\sum_{i,j=1}^{n} c_i^* c_j H_{ij}\right)$ について考える。i は $1, 2, 3, \cdots, n$ の n 通りの値をとるが，$i = 1$ の場合を考えると，求められている微分は c_1^* での微分であるから，c_1^* を含まない行は微分の対象外となる（というか，微分すると 0 になる）。すなわち，c_1^* を含む行だけを考えればよい。

$$\frac{\partial}{\partial c_1^*}\left(\sum_{i,j=1}^{n} c_i^* c_j H_{ij}\right) = \frac{\partial}{\partial c_1^*}\left(c_1^* c_1 H_{11} + c_1^* c_2 H_{12} + c_1^* c_3 H_{13} + \cdots + c_1^* c_n H_{1n}\right) \tag{9}$$

$$= c_1 H_{11} + c_2 H_{12} + c_3 H_{13} + \cdots + c_n H_{1n} \tag{10}$$

$$= \sum_{j=1}^{n} c_j H_{1j} \tag{11}$$

[1]なお，テキストでは (11.65) 式に相当する。また，テキスト中では a と b ではなく，η と ξ を使っている。

次に，$i=2$ の場合を考えると，求められている微分は c_2^* での微分であるから，c_2^* を含む行だけを考えればよい。

$$\frac{\partial}{\partial c_2^*}\left(\sum_{i,j=1}^{n} c_i^* c_j H_{ij}\right) = \frac{\partial}{\partial c_2^*}\left(c_2^* c_1 H_{21} + c_2^* c_2 H_{22} + c_2^* c_3 H_{23} + \cdots + c_2^* c_n H_{2n}\right) \tag{12}$$

$$= c_1 H_{21} + c_2 H_{22} + c_3 H_{23} + \cdots + c_n H_{2n} \tag{13}$$

$$= \sum_{j=1}^{n} c_j H_{2j} \tag{14}$$

同様に，$i=3$ の場合，$i=n$ の場合は次のような結果を得る。

$$\frac{\partial}{\partial c_3^*}\left(\sum_{i,j=1}^{n} c_i^* c_j H_{ij}\right) = \sum_{j=1}^{n} c_j H_{3j} \tag{15}$$

$$\frac{\partial}{\partial c_n^*}\left(\sum_{i,j=1}^{n} c_i^* c_j H_{ij}\right) = \sum_{j=1}^{n} c_j H_{nj} \tag{16}$$

以上より，c_i^* での微分は,

$$\frac{\partial}{\partial c_i^*}\left(\sum_{i,j=1}^{n} c_i^* c_j H_{ij}\right) = \sum_{j=1}^{n} c_j H_{ij} \tag{17}$$

と書けることがわかる。**ただし，**「i は $1, 2, \cdots, n$ の n 通りの値をとる」という但し書きがあることを忘れてはいけない。