

正誤表

2021年6月14日

初版第2刷以前

これは、初版第2刷以前のものに対する正誤表です。

正誤表 2-1

修正番号	頁	行・見出し番号	誤 (修正箇所)	正 (修正・加筆方法)
1	v	12.2 節の節名	Slater 軌道	Slater 型軌道
2	5	(1.5) 式すぐ下の行	その複素共役 $e^{-i\theta} \cdot \Psi$	その複素共役 $e^{-i\theta} \cdot \Psi^*$
3	8	脚注*7	ここでは Yong の	ここでは Young の
4	9	(1.22) 式すぐ下の行	Schödinger	Schrödinger
5	15	(1.44) 式下 2 行目	「Hermite 演算子の固有関数が...」の 1 文を削除する。	
6	17	(1.50) 式 1 行目	演算子を \sum の中に入れた	\hat{F} は線形演算子だから
7	18	(1.55) 式 2 行目	展開した	\hat{F} は線形演算子だから
8	19	(1.60) 式 1 行目	\hat{F} を \sum の中に入れた	\hat{F} は線形演算子だから
9	19	脚注*12 の 1 行目	$\hat{F}\hat{G}\psi = 3x^2$, $\hat{G}\hat{F}\psi = 2x^2$	$\hat{F}\hat{G}\psi = 2x^2$, $\hat{G}\hat{F}\psi = 3x^2$
10	27	表 2.0 中の $\Phi(\phi)$	$e^{-im\phi}$	$e^{im\phi}$
11	31	(2.13) 式 2 行目	展開した	(1.73) 式より
12	32	(2.20) 式 2 行目, 3 行目	展開した	(1.73) 式より
13	32	(3.8) 式の下 4,5 行目	$n = k$ とした波動関数と比べて... 以下を下記に修正	
		$n = k$ とした波動関数と比べて -1 倍しか変わらない。この「 -1 倍の違い」は位相因子の違いであるから、これらを異なる解とはみなさない。すなわち、 n の値は正の値か負の値のどちらかだけでよいから、わざわざ負の値をとらず、正の値だけとした。		

正誤表 2-2

修正番号	頁	行・見出し番号	誤 (修正箇所)	正 (修正・加筆方法)
14	46	(4.1) 式	$U(x)$	$U(x, y)$
15	46	(4.3) 式	$U(\phi)$	$U(r, \phi)$
16	47	(4.6) 式の下 4 行目	指数関数 $e^{i\theta}$	指数関数 $e^{i\phi}$
17	48	4.3.1 の最後の段落	Ψ (4 箇所)	Φ (4 箇所)
18	52	図 4.3(c)	軸のスケールがわかりにくい	15 頁の添図参照
19	54	(5.1) 式	$U(x)$	$U(x, y, z)$
20	61	図 5.2	下図に修正 (P_2^1 が異なる)	
21	66	(5.95) 式のすぐ下	「ちなみに, ……」以下, 本頁末までの文章を差し替え。 差し替えは 16 ページを参照してください。	
22	66	(5.97) 式	$(x^2 - 1)^\ell \cdot (x^2 - 1)^\ell dx$	$(x^2 - 1)^\ell \cdot (x^2 - 1)^i dx$
23	75	脚注*3	$\alpha = \sqrt{\frac{\hbar^2 k \cdot 1}{\hbar \cdot \hbar}} = \sqrt{k}$	$\alpha = \sqrt{\frac{\hbar^2 k}{\hbar} \cdot \frac{1}{\hbar}} = \sqrt{k}$
24	87	演習問題 9	$\partial^2/\partial y^2$ と $\partial^2/\partial z^2$	$\partial^2/\partial x^2$ と $\partial^2/\partial y^2$

正誤表 2-3

修正番号	頁	行・見出し番号	誤 (修正箇所)	正 (修正・加筆方法)
25	88	(8.26) 式 2 行目 第 4 項	$\frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2}$	$\frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2}$
		(8.26) 式 4 行目 第 1 項	$\left(r^2 \frac{\partial^2}{\partial r^2} \right)$	$\left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right)$
		(8.27) 式第 1 項	$\left(r^2 \frac{\partial^2}{\partial r^2} \right)$	$\left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right)$
		(8.28) 式第 1 項	$\left(r^2 \frac{\partial^2}{\partial r^2} \right)$	$\left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right)$
		(8.29) 式第 1 項	$\left(r^2 \frac{\partial^2}{\partial r^2} \right)$	$\left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right)$
26	89	(8.31) 式	$\hat{\ell}_y = -i\hbar \left(z \frac{\partial}{\partial x} - z \frac{\partial}{\partial z} \right)$	$\hat{\ell}_y = -i\hbar \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right)$
27	90	(8.35) 式	$\underbrace{\cot^2 \theta \cos^2 \phi \frac{\partial^2}{\partial \phi^2}}_{=D}$	$\underbrace{\cot^2 \theta \cos \phi \frac{\partial}{\partial \phi} \cos \phi \frac{\partial}{\partial \phi}}_{=D}$
28	90	(8.36) 式	$\underbrace{\cot^2 \theta \sin^2 \phi \frac{\partial^2}{\partial \phi^2}}_{=H}$	$\underbrace{\cot^2 \theta \sin \phi \frac{\partial}{\partial \phi} \sin \phi \frac{\partial}{\partial \phi}}_{=H}$
29	90	(8.41) 式	上記の変更 (2 箇所) に伴い, 以下のように変更する	
			$D + H + I = \cot^2 \theta \left(\cos \phi \frac{\partial}{\partial \phi} \cos \phi \frac{\partial}{\partial \phi} + \sin \phi \frac{\partial}{\partial \phi} \sin \phi \frac{\partial}{\partial \phi} \right) + \frac{\partial^2}{\partial \phi^2}$ $= \cot^2 \theta \left(\cos \phi (-\sin \phi) \frac{\partial}{\partial \phi} + \cos^2 \phi \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} + \sin \phi \cos \phi \frac{\partial}{\partial \phi} + \sin^2 \phi \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) + \frac{\partial^2}{\partial \phi^2}$ $= \cot^2 \theta \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} + \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} = \frac{\cos^2 \theta}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} + \frac{\sin^2 \theta}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} = \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2}$	
30	92	(8.44) 式 1 行目左辺	$\Omega =$ を $S =$ に変更 ($\Omega =$ のままだでも間違いではないが, dS の積分結果だから S の方が自然)	
31	92	(8.44) 式の下 2 行目	「面積素片は立体角とよばれることもある」の 1 文を削除	
32	99	(9.28) 式最下行	両辺に $\frac{2m_e r^2 \sin^2 \theta}{\hbar^2 R \Theta \Phi}$ をかけた	両辺に $-\frac{2m_e r^2 \sin^2 \theta}{\hbar^2 R \Theta \Phi}$ をかけた

正誤表 2-4

修正番号	頁	行・見出し番号	誤 (修正箇所)	正 (修正・加筆方法)
33	106	(9.51) 式 2 行目	$\frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta (e^{i\phi} - e^{-i\phi})$	$\frac{1}{\sqrt{2}i} \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta (e^{i\phi} - e^{-i\phi})$
34	106	(9.51) 式 2 行目	$\frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta$ でくくった	$\frac{1}{\sqrt{2}i} \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta$ でくくった
35	112	(9.60) 式の下 5 行目	図 9.13(b) には	図 9.13(b), (c) には
36	112	(9.60) 式の下 10 行目	図 9.13(c) には	図 9.13(d) には
37	115	(9.70) 式の 2 行目	展開した	(1.73) 式より
38	120	図 9.18	図中の \hat{l}_+, \hat{l}_-	\hat{l}_+, \hat{l}_-
39	120	図 9.18	$Y_{1,0} = \sqrt{\frac{3}{4}} \cos \theta$	$Y_{1,0} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta$
40	121	(9.91) 式	式中の $\sqrt{\frac{3}{4\pi}}$ を全て	$\sqrt{\frac{3}{8\pi}}$ 3箇所あり
41	121	(9.91) 式の最下行	$= -\hbar e^{-2i\phi} \dots$	$= -\hbar e^{-2i\phi} \dots$
42	121	(9.91) 式のすぐ下	\dots となった。 $l = \ell$ の場合,	\dots となった。 $\ell = 1$ の場合,
43	124	(9.115) 式	$E = -\frac{\hbar^2 Z^2}{2m_e a_0^2} \dots$	$E = -\frac{\hbar^2 Z^2}{2m_e a_0^2} \dots$
44	136	証明の最後の行	$\mu B \cos \theta = -\mu B$ を	$-\mu B \cos \theta = -\mu B$ を
45	139	5 行目	\dots を $\sigma = 1/2$ としよう *4	\dots を $\sigma = -1/2$ としよう *4
46	144	(10.41) 式, (10.42) 式	右辺に規格化定数 $\frac{1}{\sqrt{2}}$ を追加	
47	145	(10.43) 式, (10.44) 式	右辺に規格化定数 $\frac{1}{\sqrt{2}}$ を追加	
48	149	3 行目	対応する固有値は 1 つだけ	対応する固有値は 1 組だけ
49	150	(11.11) 式の下 2 行目	1 次摂動 $E_m^{(1)}$ を求めよう。	1 次摂動 $E_n^{(1)}$ を求めよう。
50	155	本文下から 4 行目	「 $p = 1.1124$ を得る。」の末尾に以下の脚注を追加 *4 証明は省略する。	
51	158	(11.41) 式の 1 行目	$+\lambda H'_{00}$	$+H'_{00}$

正誤表 2-5

修正番号	頁	行・見出し番号	誤 (修正箇所)	正 (修正・加筆方法)
52	158	(11.41) 式の 2 行目	$4\pi\epsilon r_{12}$	$4\pi\epsilon_0 r_{12}$
53	160	(11.50) 式のすぐ後	<p>「を得る。」の末尾に以下の脚注を追加</p> <p>*8 ただし, 3 行目の括弧の中の最初の項に上限 ∞ を代入すると, ∞/e^∞ となるが, これは l'Hôpital の定理により, 0 となることが示される。</p>	
54	164	(11.68) 式のすぐ下	… は 11.7 節を参照せよ。	… は次頁を参照せよ。
55	164	(11.71) 式のすぐ下	という関係を満たす。	<p>という関係を満たすことが証明されている。+ 末尾に以下の脚注を追加</p> <p>*9 証明は省略する。</p>
56	165	(11.77) 式	左端に $\begin{cases} ax + by = 0 \\ cx + dy = 0 \end{cases}$ <small>この場合は</small> を追加して, 以下のよう する	
			$\begin{cases} ax + by = 0 \\ cx + dy = 0 \end{cases}$ <small>この場合は</small> $A = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}$ <small>この逆行列は</small> $A^{-1} = \frac{\begin{pmatrix} d & -b \\ -c & a \end{pmatrix}}{\begin{vmatrix} a & b \\ c & d \end{vmatrix}} = \frac{\begin{pmatrix} d & -b \\ -c & a \end{pmatrix}}{D}$	
57	169	(11.97) 式	$+\lambda^2(\dots)$	$+\lambda^2(\dots) = 0$
58	169	(11.99) 式	ただし, j は縮退状態	ただし, n は縮退状態
59	171	(11.107) 式 5 行目	$\sum_{j=1}^f (c_j - \lambda a_{nj}) \psi_{nj}^{(0)}$	$\sum_{j=1}^f (c_j + \lambda a_{nj}) \psi_{nj}^{(0)}$
60	171	(11.107) 式 6 行目	$c_j - \lambda a_{nj}$ をあらためて…	$c_j + \lambda a_{nj}$ をあらためて…
61	174	先頭から 2 行	<p>以下に変更</p> <p>となる。つまり, Hartree 積型波動関数は反対称の要請を満足せず, 多電子系の波動関数としては十分ではない。</p>	
62	177	5 行目	Schödinger	Schrödinger
63	179	脚注*7 の 3 行目	Legendre の未定乗数法	Lagrange の未定乗数法
64	181	12.2 節の節名	Slater 軌道	Slater 型軌道
65	181	(12.35) 式	$-\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta$	$-\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta_i$

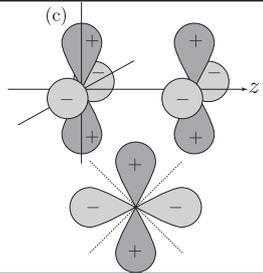
正誤表 2-6

修正番号	頁	行・見出し番号	誤 (修正箇所)	正 (修正・加筆方法)
66	181	(12.36) 式の下 3 行	以下に変更 としたことに相当する。(12.35) 式は水素類似原子の Schrödinger 方程式と同じ形をしているから, $\Psi_{n,\ell,m}(r,\theta,\phi) = R'_{n,\ell}(r) \cdot Y_{\ell,m}(\theta,\phi) \quad (12.36)$ と変数分離することで解を求めることができる。ただし, ϕ_i を $\Psi_{n,\ell,m}(r,\theta,\phi)$ で置き換えた。	
67	182	9 行目の (c)	… ときは, 1 つ内側の軌道 にある 1 個の電子につき …	… ときは, n が 1 だけ小さい電子 1 個につき …
68	189	図 12.6(a)	縦軸: 500, 1000, …, 2500	縦軸: 5.00, 10.00, …, 25.00
69	189	図 12.6(b)	F の電子親和力 4.4	F の電子親和力 3.4
70	192	8 行目	現代の周期表を表 1 (表紙裏) に示した。	表紙裏に現代の周期表を示した。
71	194	12.6.2 項 4 行目	固有値を	量子数を
72	194	(12.52) 式すぐ上の行	Schödinger	Schrödinger
73	195	脚注*23 の 2 行目	電子スピンの角運動量 s	電子のスピンの角運動量 s
74	195	下から 2 行目	というのも, 通常の分子では	というのも, 通常の原子では
75	197	本文だけ数えて 18 行目	$J = 3, 2, 1$	$J = 2, 1, 0$
76	197	角運動量の合成則	以下に変更 たがいに可換な角運動量演算子 \hat{L} と \hat{S} の和で与えられる演算子 \hat{J} を考える。 \hat{L} と \hat{S} のそれぞれの自乗の量子数が L, S であるならば, \hat{J} の自乗の量子数 J は $J = L + S, L + S - 1, \dots, L - S $ の値をとる。	
77	197	下から 2 行目	$2 : (M_L, M_S) = (2, 0), (1, 1), \underbrace{(0, 2)}_{\text{削除}}, M_J = \dots$	
78	197	下から 1 行目	$\dots, M_J = -2 : (M_L, M_S) = (-2, 0), \underbrace{(-1, -1)}_{\text{追加}}$	
79	200	脚注 25 の 6 行目	さいわいにし, てここで	さいわいにして, ここで

正誤表 2-7

修正番号	頁	行・見出し番号	誤 (修正箇所)	正 (修正・加筆方法)
80	208	3 行目	これには $\hat{l}_{iz} = -\hbar(\dots$	これには $\hat{l}_{iz} = -i\hbar(\dots$
81	208	(12.77) 式 1 行目	, $-\hbar$ (, $-i\hbar$ (
82	208	(12.77) 式 2 行目左辺	$-C/\hbar$	$-C/i\hbar$
83	208	(12.80) 式 1 行目左辺	$-C/\hbar$	$-C/i\hbar$
84	208	(12.82) 式最左辺	$-C/\hbar$	$-C/i\hbar$
85	208	(12.82) 式最右辺	$-\hbar$ ($-i\hbar$ (
86	208	(12.83) 式右辺	$-\hbar$ ($-i\hbar$ (
87	213	(13.1) 式のすぐ上	Boh 半径	Bohr 半径
88	214	表 13.1 の 1 行目	a_0	$a_0 \rightarrow 1$
89	215	脚注*1 の 1 行目	原子殻	原子核
90	220	図 14.6 の caption	φ_u	φ_u
91	221	図 14.7 の caption	φ_u	φ_u
92	221	図 14.7 の caption	$ \varphi_g ^2$ は電子間で...	$ \varphi_g ^2$ は原子間で...
93	222	図 14.8	<p>下図に修正：</p>	
94	223	(14.26) 式のすぐ下	すると, (14.22) 式と	すると, (14.21) 式, (14.22) 式と

正誤表 2-8

修正番号	頁	行・見出し番号	誤 (修正箇所)	正 (修正・加筆方法)
95	233	(15.28) 式	$\gamma = 0.5772215$ (以後省略)	$\gamma = 0.577215$ (以後省略)
96	235	(15.37) 式	$\gamma = 0.5772215$ (以後省略)	$\gamma = 0.577215$ (以後省略)
97	239	(15.45) 式の最後	(C.88) 式より	(C.89) 式より
98	242	(16.7) 式から 3 行目	$\hat{h} = -\Delta_i^2/2 + \sum_A^N Z_A \cdots$	$\hat{h} = -\Delta_i/2 - \sum_A^N Z_A \cdots$
99	246	(16.28) 式の 1 行目と 2 行目	$R_{n,\ell}(r)$	$R'_{n,\ell}(r)$
100	247	図 16.7(c)	右図に修正 (位相が異なる)	
101	252	図 16.14	$\sigma_g 2p$ のエネルギー準位の下に $\lambda = 0$ を追加	
102	259	(16.59) 式	dz	dv (2 箇所)
103	259	(16.59) 式のすぐ後	以下を追加 ただし, 2 つの核の電荷は原子単位で 1 とした。	
104	259	(16.60) 式	$[\cdots + \lambda^2 \langle z \rangle_a]$	$[\cdots + \lambda^2 \langle z \rangle_b]$
105	264	上から 3 行目	semioccupied orbital	semioccupied molecular orbital
106	264	上から 6 行目	unoccuoied	unoccupied

正誤表 2-9

修正番号	頁	行・見出し番号	誤 (修正箇所)	正 (修正・加筆方法)
107	279	下から 4 行目	π 電子系	π 電子系
108	280	(18.6) 式	$h_{\mu\nu} = \int \chi_{\mu} \hat{h} \chi_{\nu} dv$	$h_{\mu\nu} = \int \chi_{\mu}^* \hat{h} \chi_{\nu} dv$
			$S_{\mu\nu} = \int \chi_{\mu} \chi_{\nu} dv$	$S_{\mu\nu} = \int \chi_{\mu}^* \chi_{\nu} dv$
109	282	12 行目	$2 \beta $	2β
110	283	(18.22) 式の 2 行上	$2 \beta \times 2 = 4 \beta $	$2\beta \times 2 = 4\beta$
111	283	(18.22) 式	$4.472 \beta - 4 \beta = 0.472 \beta $	$4.472\beta - 4\beta = 0.472\beta$
112	285	(18.35) 式の下 1 行目	図 18.10	図 18.1(a)
113	285	図 18.11	エネルギー準位図部分を右図に修正 (α 準位を含めて全てが等間隔になるように)	
114	286	(18.37) 式	$E'_{\pi} - E_{\pi} = 3(2\alpha + 2\beta) - (6\alpha + 8\beta) = -2\beta$	$E_{\pi} - E'_{\pi} = (6\alpha + 8\beta) - 3(2\alpha + 2\beta) = 2\beta$
115	286	(18.38) 式の 2 行下	-2β	$2 \beta $
116	286	(18.39) 式の 3 行下	-0.472β	0.472β
117	286	(18.39) 式の 5 行下	$49 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$	$-49 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$
118	286	(18.39) 式の 5 行下	$43 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$	$-43 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$

正誤表 2-10

修正番号	頁	行・見出し番号	誤(修正箇所)	正(修正・加筆方法)
119	288	(18.46) 式のすぐ下の行	…と書けることがわかった。の後に、以下を追加 ここで、 $k = 0$ とすると、 $\theta = 0$ となり、(18.42) 式より $c_m = 0$ となり都合が悪いから $k = 1$ からはじめるのがよい。また、 $\lambda = 2 \cos \theta$ であるから、 λ の個数と θ の個数は等しい。また、 $E = \alpha + \lambda\beta$ であるから、 λ の個数は MO の個数に等しい。いま、 n 個の AO が相互作用していることを考えているから、これからつくられる MO の個数は n 個である。すなわち、 λ の個数は n 個であるから、 θ も n 個とればよい。よって、 k は 1 から n までの n 個とれば十分である。	
120	289	(18.49) 式の一番上の行	等比数列だった	等比数列の和だった
121	292	(18.68) 式のすぐ下	以下を追加 ここで、 χ_m は規格化されていることを用い、重なり積分は無視した (Hückel 法)。	

正誤表 2-11

修正番号	頁	行・見出し番号	誤 (修正箇所)	正 (修正・加筆方法)
122	296	図 18.23 左下 q_1 の囲み	2×0.372^3	2×0.372^2
123	298	図 18.26(a) と (b)	内側の炭素原子の自由原子価を 0.389 から 0.388 に変更 (4箇所あり)	
124	298	(18.98) 上式	$p_{23} = 2 \times (\sqrt{2}/2) \times (1/2) + 1 \times 0 \times (1/\sqrt{2})$	$p_{23} = 2 \times (\sqrt{2}/2) \times (1/2) + 1 \times 0 \times (-1/\sqrt{2})$
125	299	(18.114) 式	$p_{23} = 2 \times (\sqrt{2}/2) \times (1/2) + 2 \times 0 \times 1/\sqrt{2}$	$p_{23} = 2 \times (\sqrt{2}/2) \times (1/2) + 2 \times 0 \times (-1/\sqrt{2})$
126	299	図 18.27	右図に差し替え	<p>(a) $\text{H}_2\text{C}=\overset{\cdot}{\text{C}}\text{H} \leftrightarrow \text{H}_2\overset{\cdot}{\text{C}}-\overset{\text{H}}{\text{C}}=\text{CH}_2$</p> <p>(b) $\text{H}_2\text{C}=\overset{+}{\text{C}}\text{H} \leftrightarrow \text{H}_2\overset{+}{\text{C}}=\overset{\text{H}}{\text{C}}=\text{CH}_2$</p> <p>(c) $\text{H}_2\text{C}=\overset{-}{\text{C}}\text{H} \leftrightarrow \text{H}_2\overset{-}{\text{C}}-\overset{\text{H}}{\text{C}}=\text{CH}_2$</p>

正誤表 2-12

修正番号	頁	行・見出し番号	誤 (修正箇所)	正 (修正・加筆方法)
127	303	(18.153) 下式	α^O (上付きの O を)	α_O (下付き O に変更)
		(18.153) 式のすぐ下の行		
		(18.155) 式		
128	303	(18.157) 式	α^X (上付きの X を)	α_X (下付き X に変更)
129	305	(18.167) 式と (18.168) 式	上から 3 つめの式から c_6 を削除	
130	306	図 18.34	結合次数を 0.655 から 0.665 に変更	
131	319	(19.9) 式のすぐ上の行	$\sin \theta = -1/2, \cos \theta = \sqrt{3}/2$	$\sin \theta = \sqrt{3}/2, \cos \theta = -1/2$
132	330	上から 2 行目	$\overset{\text{部分群}}{\sigma_v}$	類
133	331	上から 3 行目	$\sigma_v = C_3 \sigma_v''$	$\sigma'_v = C_3 \sigma_v''$
134	331	上から 4 行目	$D(\sigma_v) = D(C_3)D(\sigma_v'')$	$D(\sigma'_v) = D(C_3)D(\sigma_v'')$
135	335	表 21.1 の下から 2 行目	$\sigma_v = C_3 \sigma_v''$	$\sigma'_v = C_3 \sigma_v''$
			$D(\sigma_v) = D(C_3)D(\sigma_v'')$	$D(\sigma'_v) = D(C_3)D(\sigma_v'')$
136	342	表 21.9 の最下行	B_1	B_2
137	343	図 21.5(b)	σ_v	σ'_v
138	345	(21.27) 式の上の段落	$f(x) = x^2 + y^2$ 3 箇所あり	$f(x, y) = x^2 + y^2$ 3 箇所とも修正

正誤表 2-13

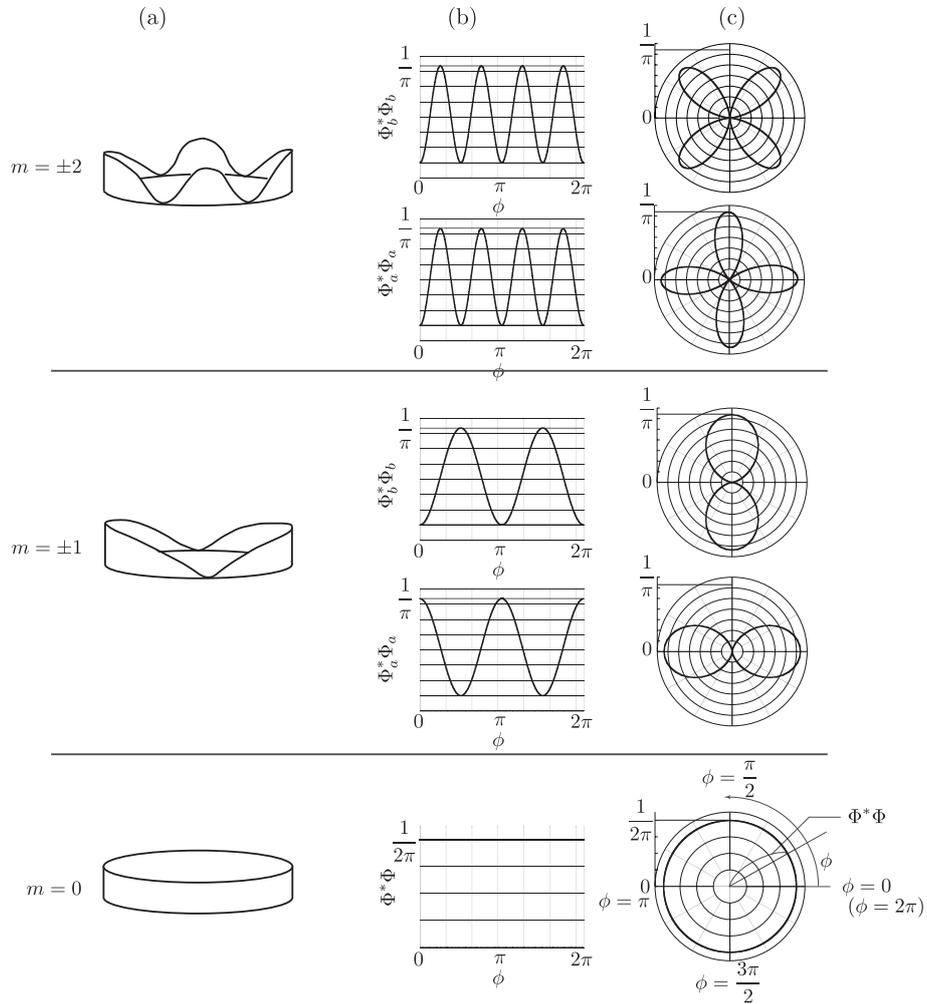
修正番号	頁	行・見出し番号	誤 (修正箇所)	正 (修正・加筆方法)
139	346	解答 44 の C_3	$\underbrace{\begin{pmatrix} \frac{1}{2} & -\sqrt{3} \\ -\frac{\sqrt{3}}{4} & \frac{1}{2} \end{pmatrix}}_{\text{指標}=-1}$	$\underbrace{\begin{pmatrix} \frac{1}{2} & -\sqrt{3} \\ \frac{\sqrt{3}}{4} & \frac{1}{2} \end{pmatrix}}_{\text{指標}=-1}$
140	371	上から 2 行目	$\psi_{\text{vib}}^f \psi_{\text{vib}}^i$ は $(\psi_{\text{vib}}^i)^2$	$\psi_{\text{rot}}^f \psi_{\text{rot}}^i$ は $(\psi_{\text{rot}}^i)^2$
141	373	本文 4 行目と 24.1.1 項名	C_4H_4	C_4H_6
142	383	(24.30) 式	ψ_{vib}^i 2 箇所あり	ψ_{vib}^f 2 箇所とも修正
143	383	下から 3 行目	励起状態 ψ_{vib}^i を	励起状態 ψ_{vib}^f を
144	419	「第 12 章」の前	以下の脚注を追加 第 11 章 155 頁 変分パラメータ p の計算。 164 頁 $E_{\varphi_2}, E_{\varphi_3}, \dots$ が励起状態のエネルギー近似値 であること。	
145	420	改頁発生		

正誤表 2-14 この修正に関しては、修正番号を 200 に固定します。

修正番号	頁	行・見出し番号	該当箇所を以下のように修正
200			「変数分離」に関する 4 箇所の説明がわかりづらいので、以下のように修正
200.(a)	10	(1.25) 式の下 6 行	(1.25) 式をみると、左辺は r だけを変数として含み、右辺は t だけを変数として含む。左辺に注目すると、関数 $\psi(r)$ に \hat{H} を作用させ、その結果を $\psi(r)$ 自身で除しているが、 r だけを変数として含む関数 $\psi(r)$ にいかなる操作をしようとも、その結果が変数 t を含むわけがない。右辺も同じで、関数 $f(t)$ を t で微分して、 $i\hbar/f(t)$ をかけているが、やはり t だけを変数として含む関数 $f(t)$ にどのような操作をしようとも、その結果が r を含むわけがない。しかし、(1.25) 式は左辺と右辺が等号で結ばれている。このような状況が成り立つのは、左辺も右辺も定数である場合だけである。この定数を E とすると、(1.25) 式の右辺から、
200.(b)	42	上から 3 行	左辺は x だけを変数として含むから、これに等しい右辺も x だけを変数として含まなければならないが、右辺はそうっておらず、 y と z を変数として含んでいる。このような状況が成り立つのは、左辺の値が x を含まない場合、すなわち、左辺が定数の場合である。
200.(c)	55	(5.5) 式の下 6 行	この式は、左辺は θ だけの関数であり、右辺は ϕ だけの関数である。右辺に注目すると、関数 $\Phi(\phi)$ を ϕ で 2 回微分して、その結果を自分自身 $-\Phi$ で除しているが、 ϕ だけを変数として含む関数 $\Phi(\phi)$ に対し、いかなる操作をしようとも、その結果が変数 θ を含むわけがない。左辺については少し複雑だが、 θ だけを変数として含む関数 $\Theta(\theta)$ と $\sin \theta$ にいかなる操作をしようとも、やはり、その結果が ϕ を含むわけがない。これらが等号で結ばれるような状況が成り立つのは、左辺も右辺も定数である場合だけである。以上より、(5.5) 式は次の 2 つの方程式に分けて考えてよいことがわかった。
200.(d)	96	(9.3) 式の下 3 行目から 6 行	(もう何度も説明して来たが、) 右辺に注目すると、関数 $\Phi(\phi)$ を ϕ で 2 回微分して、その結果を自分自身 $-\Phi$ で除しているが、 ϕ だけを変数として含む関数 $\Phi(\phi)$ に対し、いかなる操作をしようとも、その結果が変数 θ や r を含むわけがない。左辺は右辺に比べてずっと複雑だが、 θ だけを変数として含む関数 $\Theta(\theta)$ や r だけを変数として含む関数 $R(r)$ にいかなる操作をしようともその結果が変数 ϕ を含むわけがない。これらが等号で結ばれるような状況が成り立つのは、左辺も右辺も定数である場合だけである。しかも、右辺 = 定数とおいた微分方程式はすでに解いたことのある形をしている。では、ここから片づけよう。

修正 18 について 図が大きいので，こちらに示しました。

修正追加資料



修正 21 について 訂正が長いので、次の資料を準備しました。

修正追加資料

次に Legendre の陪多項式の直交性を示す。これには、(5.59) 式を用いるとよい。(5.59) 式で最初の二項は、 $(1-x^2) \cdot du/dx$ を x で微分したもの（積の微分）に他ならない。そこで、(5.59) 式で u を P_ℓ^m と P_n^m に書き換えると次のようになる。

$$\frac{d}{dx} \left((1-x^2) \frac{dP_\ell^m}{dx} \right) + \left[\ell(\ell+1) - \frac{m^2}{1-x^2} \right] P_\ell^m = 0 \quad (1)$$

$$\frac{d}{dx} \left((1-x^2) \frac{dP_n^m}{dx} \right) + \left[n(n+1) - \frac{m^2}{1-x^2} \right] P_n^m = 0 \quad (2)$$

(1) 式に P_n^m をかけ (2) 式に P_ℓ^m をかけて辺々差し引く。

$$P_n^m \frac{d}{dx} \left((1-x^2) \frac{dP_\ell^m}{dx} \right) - P_\ell^m \frac{d}{dx} \left((1-x^2) \frac{dP_n^m}{dx} \right) + [\ell(\ell+1) - n(n+1)] P_n^m P_\ell^m = 0 \quad (3)$$

ところで、 P_n^m と $((1-x^2)dP_\ell^m/dx)$ の積の微分から、

$$P_n^m \frac{d}{dx} \left((1-x^2) \frac{dP_\ell^m}{dx} \right) = \frac{d}{dx} \left[P_n^m \cdot \left((1-x^2) \frac{dP_\ell^m}{dx} \right) \right] - \frac{dP_n^m}{dx} \times \left((1-x^2) \frac{dP_\ell^m}{dx} \right) \quad (4)$$

がいえる。もちろん同様に、

$$P_\ell^m \frac{d}{dx} \left((1-x^2) \frac{dP_n^m}{dx} \right) = \frac{d}{dx} \left[P_\ell^m \cdot \left((1-x^2) \frac{dP_n^m}{dx} \right) \right] - \frac{dP_\ell^m}{dx} \times \left((1-x^2) \frac{dP_n^m}{dx} \right) \quad (5)$$

も成り立つ。(4) 式と (5) 式の右辺第 2 項は同じものだから、(4) 式と (5) 式を (3) 式に代入すれば、

$$\frac{d}{dx} \left[P_n^m \left((1-x^2) \frac{dP_\ell^m}{dx} \right) - P_\ell^m \left((1-x^2) \frac{dP_n^m}{dx} \right) \right] + [\ell(\ell+1) - n(n+1)] P_n^m P_\ell^m = 0 \quad (6)$$

を得る。これを $-1 \leq x \leq 1$ で積分すると、第 1 項目は $(1-x^2)$ があるから消える。また、 $\ell \neq n$ では、 $[\ell(\ell+1) - n(n+1)] \neq 0$ だから、

$$\int_{-1}^1 P_n^m P_\ell^m dx = 0 \quad (7)$$

がいえる。これで、Legendre の陪多項式の直交性が示せた。

修正 25 について 訂正が多くの箇所に及ぶので、次の資料を準備しました。

赤字の部分が修正箇所です。

修正追加資料

以上で準備ができたので、いよいよ Δ を求めよう。(8.23) 式 ~ (8.25) 式を足し合わせると、

$$\begin{aligned}
 \Delta &= \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \\
 &= \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{\cos \theta}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \\
 &= \frac{1}{r^2 \sin \theta} \left[\sin \theta \left(2r \frac{\partial}{\partial r} + r^2 \frac{\partial^2}{\partial r^2} \right) + \left(\cos \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \sin \theta \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \right) + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right] \quad \frac{1}{r^2 \sin \theta} \text{ をくくりだした} \\
 &= \frac{1}{r^2 \sin \theta} \left[\sin \theta \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right] \quad \text{積の微分の逆を計算した}
 \end{aligned} \tag{8.26}$$

を得る。これが極座標系におけるラプラシアンを表式である。これに $-\hbar^2/(2m)$ を乗じて、ポテンシャルエネルギー $U(r, \theta, \phi)$ を加えればハミルトニアンが得られる。

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2 \sin \theta} \left[\sin \theta \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right] + U(r, \theta, \phi) \tag{8.27}$$

2次元回転運動のハミルトニアン：(4.4) 式について

第4章では2次元における回転運動を扱った。……………

にこれらの条件を入れると、ハミルトニアンは次のようになる。

$$\begin{aligned}
 \hat{H} &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r_1^2 \underbrace{\sin \theta}_1} \left[\underbrace{\sin \theta}_{=1} \underbrace{\frac{\partial}{\partial r}}_{\rightarrow 0} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \underbrace{\frac{\partial}{\partial \theta}}_{\rightarrow 0} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \underbrace{\frac{1}{\sin \theta}}_{=1} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right] + U(\phi) \\
 &= -\frac{\hbar^2}{2mr_1^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} + U(\phi) \quad \text{整理した}
 \end{aligned} \tag{8.28}$$

(4.4) 式におけるハミルトニアンはこの表式を用いた。

3次元回転運動のハミルトニアン：(5.3) 式について

第5章では3次元における回転運動を扱った。……………

$$\begin{aligned}
 \hat{H} &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r_1^2 \sin \theta} \left[\sin \theta \underbrace{\frac{\partial}{\partial r}}_{\rightarrow 0} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right] + U(\theta, \phi) \\
 &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r_1^2 \sin \theta} \left[\frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right] + U(\theta, \phi) \quad \text{整理した} \\
 &= -\frac{\hbar^2}{2mr_1^2} \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right] + U(\theta, \phi) \quad \frac{1}{\sin \theta} \text{ を分配した}
 \end{aligned} \tag{8.29}$$

(5.3) 式におけるハミルトニアンはこの表式を用いた。

以下は誤りではないので、気にすることはない。

正誤表として公表するまでもない事項（のうち、改訂したもの）

p33 ただし○ ×2

p46 ただし○ ×1

p54 ただし○ ×1

p73 表 7.1 : Hermite 多項式の一般項は $H_n(y) = (-1)^n e^{y^2} (d^n e^{-y^2} / dy^n)$ で表されるから、これに $n = 0 \sim 6$ を代入すると、

→

Hermite 多項式の一般項は $H_v(y) = (-1)^v e^{y^2} (d^v e^{-y^2} / dy^v)$ で表されるから、これに $v = 0 \sim 6$ を代入すると、

p87 (8.23) 式中の $\partial/\partial\phi$ の係数がもっと簡単にまとまる。

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2}{\partial x^2} &= \sin^2 \theta \cos^2 \phi \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{\cos^2 \theta \cos^2 \phi}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{\sin^2 \phi}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \\ &+ \left(\frac{\cos^2 \theta \cos^2 \phi + \sin^2 \phi}{r} \right) \frac{\partial}{\partial r} + \left(-\frac{2 \sin \theta \cos \theta \cos^2 \phi}{r^2} + \frac{\cos \theta \sin^2 \phi}{r^2 \sin \theta} \right) \frac{\partial}{\partial \theta} \\ &+ \frac{2 \sin \phi \cos \phi}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} + \frac{\sin \theta \cos \theta \cos^2 \phi}{r} \left(\frac{\partial}{\partial r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\partial}{\partial \theta} \frac{\partial}{\partial r} \right) \\ &- \frac{\cos \theta \sin \phi \cos \phi}{r^2 \sin \theta} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} + \frac{\partial}{\partial \phi} \frac{\partial}{\partial \theta} \right) - \frac{\sin \phi \cos \phi}{r} \left(\frac{\partial}{\partial \phi} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial}{\partial r} \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \end{aligned}$$

p87 (8.24) 式中の $\partial/\partial\phi$ の係数がもっと簡単にまとまる。

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2}{\partial y^2} &= \sin^2 \theta \sin^2 \phi \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{\cos^2 \theta \sin^2 \phi}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{\cos^2 \phi}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} + \left(\frac{\cos^2 \theta \sin^2 \phi + \cos^2 \phi}{r} \right) \frac{\partial}{\partial r} \\ &+ \left(-\frac{2 \sin \theta \cos \theta \sin^2 \phi}{r^2} + \frac{\cos \theta \cos^2 \phi}{r^2 \sin \theta} \right) \frac{\partial}{\partial \theta} \\ &- \frac{2 \sin \phi \cos \phi}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} + \frac{\sin \theta \cos \theta \sin^2 \phi}{r} \left(\frac{\partial}{\partial r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\partial}{\partial \theta} \frac{\partial}{\partial r} \right) \\ &+ \frac{\cos \theta \sin \phi \cos \phi}{r^2 \sin \theta} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} + \frac{\partial}{\partial \phi} \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{\sin \phi \cos \phi}{r} \left(\frac{\partial}{\partial \phi} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial}{\partial r} \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \end{aligned}$$

p91 図 8.2 中の (a) と (c) で $d\theta$, $d\phi$ に円弧 \sphericalangle

p97 (9.12) 式 $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \circlearrowleft \pm \ell$

p98 (9.20) 式と (9.24) 式 $e^{-\frac{\rho}{2}} \rightarrow e^{-\rho/2}$

p105 (9.44) 式の積分素片の順序を次のように変更 $\int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} r^2 \sin \theta dr d\theta d\phi \Psi^* \hat{F} \Psi$

p153 囲み中の 2 行目：一価連続な任意の関数 → 連続な任意の関数

p160 (11.50) 式の 3 行目：(C.71) 式より → (C.68) 式より

p217 (14.8) 式のすぐ下：と簡単化できる。(14.8) 式は単なる.....

p231 (15.19) 式を以下のように変更

$$\begin{aligned}
 K &= \int \phi_a(2)\phi_b(1)\hat{H}'(1,2)\phi_a(1)\phi_b(2)dv_1dv_2 \\
 &= \int \phi_a(2)\phi_b(1) \left[-\frac{1}{r_{a2}} - \frac{1}{r_{b1}} + \frac{1}{r_{12}} + \frac{1}{R} \right] \phi_a(1)\phi_b(2)dv_1dv_2 \\
 &= - \underbrace{\int \phi_b(1)\phi_a(1)dv_1}_{=S} \int \frac{\phi_a(2)\phi_b(2)}{r_{a2}}dv_2 - \underbrace{\int \phi_a(2)\phi_b(2)dv_2}_{=S} \int \frac{\phi_b(1)\phi_a(1)}{r_{b1}}dv_1 \\
 &\quad + \int \frac{\phi_a(2)\phi_b(1)\phi_a(1)\phi_b(2)}{r_{12}}dv_1dv_2 + \frac{1}{R} \underbrace{\int \phi_a(2)\phi_b(2)dv_2}_{=S} \underbrace{\int \phi_b(1)\phi_a(1)dv_1}_{=S} \\
 &= -S \int \frac{\phi_a(2)\phi_b(2)}{r_{a2}}dv_2 - S \int \frac{\phi_a(1)\phi_b(1)}{r_{b1}}dv_1 + \int \frac{\phi_a(1)\phi_b(1)\phi_a(2)\phi_b(2)}{r_{12}}dv_1dv_2 + \frac{S^2}{R}
 \end{aligned}$$

p280 (18.5) 式の上の行 「常法に従い,」 を削除

p281 (18.9) 式： $\int \chi_\mu \chi_\nu dv$ を削除し, $S_{\mu\nu} = \delta_{\mu\nu}$ とする

p288 解説文挿入 (修正番号 119) による改頁を回避するため, (18.44) 式を 1 行に変更

p292 (18.66) 式のすぐ後：「最後の變形」を「式變形」に変更

p292 (18.68) 式： $\int \left| \sum_{m=1}^n (C e^{im\theta}) \chi_m \right|^2 dv$ を： $\int \left| \sum_{m=1}^n (C e^{im\theta}) \chi_m \right|^2 dv$ に変更 (絶対値の記号を少し大きくする)

298 (18.93) 式： $\varphi_2 = \dots = \frac{\sqrt{2}}{2} (\chi_1 - \chi_3)$

298 (18.96) 式： $q_3 = 2 \times (1/2)^2 + 1 \times (-\sqrt{2}/2)^2 = 1$

298 (18.97) 式：

$$\begin{aligned}
 p_{12} &= \sum_i^{\text{OCC}} n_i c_{1i} c_{2i} = n_1 c_{11} c_{21} + n_2 c_{12} c_{22} \\
 &= 2 \times (1/2) \times (\sqrt{2}/2) + 1 \times (\sqrt{2}/2) \times 0
 \end{aligned}$$

299 (18.110) 式： $q_1 = 2 \times (1/2)^2 + 2 \times (\sqrt{2}/2)^2 = 1.5$

299 (18.112) 式： $q_3 = 2 \times (1/2)^2 + 2 \times (-\sqrt{2}/2)^2 = 1.5$

299 (18.113) 式： $p_{12} = 2 \times (1/2) \times (\sqrt{2}/2) + 2 \times (\sqrt{2}/2) \times 0 = 0.707$

p303 (18.153) 式を以下に変更

$$\left. \begin{aligned} (\alpha - E)c_1 + \beta_{CO}c_2 &= 0 \\ \beta_{CO}c_1 + (\alpha_0 - E)c_2 &= 0 \end{aligned} \right\}$$

p303 (18.158) 式のすぐ上の行：「表 18.1 によると …」を改行しない

p303 (18.158) 式を以下に変更

$$\left. \begin{aligned} (\alpha - E)c_1 + \beta c_2 &= 0 \\ \beta c_1 + (\alpha - E + \beta)c_2 &= 0 \end{aligned} \right\} \xrightarrow{\text{両辺を}\beta\text{で割ると}} \left. \begin{aligned} -\lambda c_1 + c_2 &= 0 \\ c_1 + (-\lambda + 1)c_2 &= 0 \end{aligned} \right\}$$

p365 $\langle m | \hat{H}' | k \rangle := \int \varphi_m^{(0)*}(\tau) \hat{H}' \varphi_k^{(0)}(\tau) d\tau$

p370 上から 5 行目と 6 行目 (τ, \mathbf{R}) を $(\tau; \mathbf{R})$ に変更 ×3

p370 23.3.1 項 1 行目 … 電子遷移が生じ, … → … 電子遷移が生じる。

p375 (24.15) 式 ~ (24.18) 式のイコール「=」をコロン「:」に変更

p378 (24.19) 式のイコール「=」をコロン「:」に変更

p381 (24.22) 式の直前 極小値からの変位は, → 極小値 $V(0, 0, \dots, 0)$ からの変位は,

p381 (24.22) 式 1 行目 $V(q_1, q_2, \dots, q_{N_{\text{vib}}}) - V(0, 0, \dots, 0) \rightarrow V(q_1, q_2, \dots, \odot q_{N_{\text{vib}}}) - V(0, 0, \dots, \odot 0)$

p381 (24.23) 式の上 2 行目末尾 … という → … という

p384 囲みのすぐ上の行 … と呼ばれる → … とよばれる

p388 表 24.9 のキャプションを以下に変更：

$D_{\infty h}$ の単純指標表：対称操作 C_{∞} と S_{∞} に係数 2 がついているのは，右回り ϕ と左回り $-\phi$ を区別しているからである。また， ϕ は回転角度を示している。 $2C_{\infty}(\phi)$ の次が … になっているのは， $2C_{\infty}^2(\phi)$, $2C_{\infty}^3(\phi)$, $2C_{\infty}^4(\phi) \dots 2C_{\infty}^{\infty}(\phi)$ を省略していることを示している。 $2S_{\infty}(\phi)$ の次も同様である。

p389 表 24.10 $D_{\infty h}$ の行： $\sigma_v(z y \text{ 面}) \rightarrow \sigma_v(y z \text{ 面})$

p392 3 行目 … と呼ばれる → … とよばれる

p395 「厳密に定義された値」が増えた (2019 年 5 月)

p422 文献 [23] 2 行目 … と呼ばれる → … とよばれる

p408 以下のように Gauss 積分の説明を改訂

C.4.6 Gauss 積分

次の積分を Gauss 積分という。

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}} \quad (\text{C.77})$$

証明

まずは左辺の自乗について計算するが、自乗を 2 次元積分に書き換えて、極座標で積分することにより答えを得る。

$$\begin{aligned} & \left(\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2} dx \right)^2 \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2} dx \times \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ay^2} dy \quad \text{自乗を } xy \text{ 平面での二重積分に書き換えた} \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-a(x^2+y^2)} dx dy \quad \text{まとめた} \\ &= \int_0^{\infty} r e^{-ar^2} dr \underbrace{\int_0^{2\pi} d\phi}_{=2\pi} \quad \text{極座標 (2次元) に書き換えた} \end{aligned}$$

$$x = r \cos \phi, \quad y = r \sin \phi \quad \rightarrow \quad x^2 + y^2 = r^2$$

$$dx dy = r d\phi dr \quad \text{右図参照}$$

$$\begin{aligned} &= \pi \int_0^{\infty} 2r e^{-ar^2} dr \quad \text{整理した} \\ &= \pi \int_0^{\infty} e^{-at} dt \quad r^2 = t \text{ と変数変換した} \end{aligned}$$

$r^2 = t$ の両辺を t で微分すると (ただし、左辺は連鎖法で),

$$\frac{dr^2}{dr} \frac{dr}{dt} = 1 \rightarrow 2r \frac{dr}{dt} = 1 \rightarrow 2r dr = dt$$

$$= \frac{\pi}{-a} \left[e^{-at} \right]_0^{\infty} = \frac{\pi}{a} \quad \text{積分計算した}$$

二乗が π/a だから、 $\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}}$ となる。これで (C.77) 式を証明できた。□

また、被積分関数 e^{-ax^2} は偶関数 ($x = 0$ に対して対称) だから、積分区間が半分の場合、

$$\int_0^{\infty} e^{-ax^2} dx = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{a}}$$

となる。

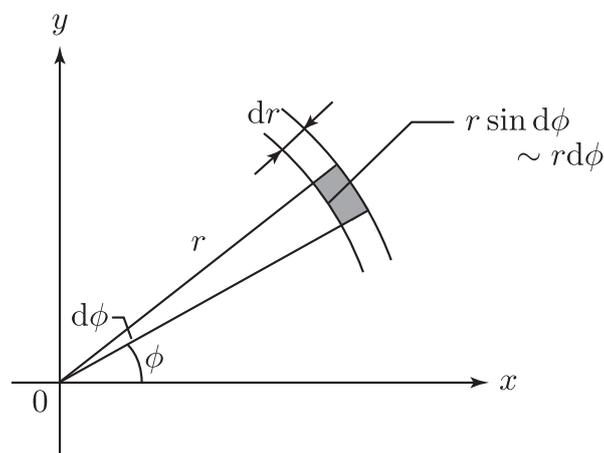


図1 2次元極座標における面積素片