

令和2年度版

# 物理数学I



# 目次

<b>1</b>	<b>ベクトルの復習</b>	<b>1</b>
1.1	内積と直交性	1
1.2	線形独立と線形従属	1
1.3	完全系	1
1.4	座標系の取り方	2
1.5	正規直交座標系	2
1.6	グラム・シュミットの直交化	3
1.7	ヒルベルト空間	4
<b>2</b>	<b>フーリエ解析</b>	<b>5</b>
2.1	フーリエ級数	5
2.1.1	区分的に連続な関数	5
2.1.2	フーリエ級数の定義	5
2.1.3	ギブスの現象	7
2.1.4	一般区間への拡張	7
2.1.5	複素フーリエ級数	8
2.1.6	ベクトルとの類似性と規格直交関数系	9
2.2	フーリエ変換	10
2.2.1	デルタ関数	10
2.2.2	フーリエ積分	10
2.2.3	フーリエ変換	11
2.2.4	微分演算とフーリエ変換	13
2.2.5	たたみこみ積分	14
2.2.6	パーセバルの関係	14
2.3	ラプラス変換	15
2.3.1	ラプラス変換の定義	15
2.3.2	基本的な関数のラプラス変換	16
2.3.3	ラプラス変換の性質	16
2.3.4	たたみこみ積分	17
<b>3</b>	<b>直交多項式としての特殊関数</b>	<b>18</b>
3.1	$\Gamma$ 関数と $B$ 関数	18
3.1.1	$\Gamma$ 関数	18
3.1.2	$B$ 関数	19
3.2	直交多項式の一般論	19
3.2.1	直交多項式の定義	19
3.2.2	一意性	20
3.2.3	漸化式	20
3.2.4	ロドリゲス (Rodrigues) の公式	22
3.2.5	グルサ (Goursat) 型積分表示	22
3.3	有限区間の直交多項式	23
3.3.1	ヤコビ (Jacobi) 多項式	23
3.3.2	ゲーゲンバウア (Gegenbauer) 多項式	23
3.3.3	ルジャンドル (Legendre) 多項式	24

3.3.4	チェビシェフ (Chebyshev) 多項式 . . . . .	27
3.4	半無限区間での直交多項式 . . . . .	28
3.4.1	ソニン (Sonine) の多項式 . . . . .	28
3.4.2	ラゲール (Laguerre) の陪多項式 . . . . .	29
3.4.3	ラゲール (Laguerre) の多項式 . . . . .	30
3.4.4	水素原子の波動関数 . . . . .	31
3.5	無限区間の直交多項式～エルミート (Hermite) 多項式 . . . . .	31
<b>4</b>	<b>微分方程式と特殊関数</b>	<b>33</b>
4.1	自己随伴演算子 . . . . .	33
4.2	スツルム・リウヴィル (Sturm-Liouville) 型微分方程式 . . . . .	34
4.3	行列との対応 . . . . .	34
4.4	直交多項式が満足する微分方程式 . . . . .	35
4.5	昇降演算子と漸化式 . . . . .	37
4.5.1	昇降演算子の一般式 . . . . .	37
4.5.2	昇降演算子の求め方 . . . . .	38
4.5.3	ルジャンドル多項式の昇降演算子 . . . . .	39
4.5.4	チェビシェフ多項式の昇降演算子 . . . . .	40
4.5.5	ソニン多項式の昇降演算子 . . . . .	40
4.5.6	エルミート多項式の昇降演算子 . . . . .	41
4.6	その他の重要な特殊関数 . . . . .	41
4.6.1	ルジャンドルの陪関数 . . . . .	41
4.6.2	球面調和関数 . . . . .	42
<b>A</b>	<b>必要な公式</b>	<b>45</b>

# 1 ベクトルの復習

## 1.1 内積と直交性

$N$ 次元の2つのベクトル,

$$\mathbf{a} = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_N \end{pmatrix}, \quad \mathbf{b} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_N \end{pmatrix},$$

が与えられたとき, その内積  $(\mathbf{a}, \mathbf{b})$  を,

$$(\mathbf{a}, \mathbf{b}) = \sum_{i=1}^N a_i^* b_i = a_1^* b_1 + a_2^* b_2 + \cdots + a_N^* b_N \quad (1.1)$$

により定義する.  $(\mathbf{a}, \mathbf{b}) = 0$  のとき, ベクトル  $\mathbf{a}$  と  $\mathbf{b}$  は直交する.

また, ベクトル  $\mathbf{a}$  のノルム (大きさ)  $|\mathbf{a}|$  を

$$|\mathbf{a}| = \sqrt{(\mathbf{a}, \mathbf{a})} \quad (1.2)$$

により定義する.

## 1.2 線形独立と線形従属

$N$ 個のベクトルの組  $\{\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \dots, \mathbf{a}_N\}$  があって,

$$\alpha_1 \mathbf{a}_1 + \alpha_2 \mathbf{a}_2 + \cdots + \alpha_N \mathbf{a}_N = \mathbf{0} \quad (1.3)$$

を満たす係数の組  $\{\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_N\}$  が,  $\alpha_1 = \alpha_2 = \cdots = \alpha_N = 0$  しかないとき,  $N$ 個のベクトルは互いに線形独立であるという.

一方, 式 (1.3) を満たす  $\{\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_N\}$  が  $\alpha_1 = \alpha_2 = \cdots = \alpha_N = 0$  以外にも存在するとき,  $N$ 個のベクトルは互いに線形従属であるという.

[例題 1.1] 以下の問いに答えなさい.

- (1) 2つのベクトル  $\mathbf{a}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ ,  $\mathbf{a}_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$  が線形独立であることを示せ.
- (2) 2つのベクトル  $\mathbf{a}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ ,  $\mathbf{a}_2 = \begin{pmatrix} 2 \\ 0 \end{pmatrix}$  が線形従属であることを示せ.
- (3) 3つのベクトル  $\mathbf{a}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ ,  $\mathbf{a}_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ ,  $\mathbf{a}_3 = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$  が線形従属であることを示せ.

## 1.3 完全系

$N$ 次元空間では, 以下のことが成り立つ.

- $N$ 個の互いに線形独立なベクトルの組  $\{\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \dots, \mathbf{a}_N\}$  を選ぶことができる. 以下では簡単のためにこの線形独立なベクトルの組を  $\{\mathbf{a}_i\}$  と書くことにする.
- 線形独立なベクトルの組は無数に存在する.

- 線形独立なベクトルの組  $\{\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \dots, \mathbf{a}_N\}$  を 1 組用意すれば, 任意のベクトル  $\mathbf{x}$  はその線形結合として,

$$\mathbf{x} = \alpha_1 \mathbf{a}_1 + \alpha_2 \mathbf{a}_2 + \dots + \alpha_N \mathbf{a}_N = \sum_{i=1}^N \alpha_i \mathbf{a}_i \quad (1.4)$$

と表される. 結合係数  $\alpha_i$  は一意的に定まる.

- この時, 線形独立なベクトルの組  $\{\mathbf{a}_i\}$  は完全系を張ると言う.
- また, 線形独立なベクトルの組  $\{\mathbf{a}_i\}$  を基底ベクトルと呼ぶ.

## 1.4 座標系の取り方

線形独立でなおかつ完全系を張るベクトルの組 (すなわち基底ベクトル)  $\{\mathbf{a}_i\}$  が決まれば座標系が決まる. 任意の点  $\mathbf{x}$  の座標は, 式 (1.4) のように  $\mathbf{x}$  を基底ベクトルの線形結合で表したときの結合係数の組を用いて  $(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_N)$  で表す.

我々はこれまで, 多くの場合にカルテシアン座標を用いてきた. 例えば, 2 次元のカルテシアン座標では基底ベクトルとして,  $\mathbf{e}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$  と  $\mathbf{e}_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$  をとる. カルテシアン座標で  $(x, y)$  で与えられる点  $\mathbf{x}$  は,

$$\mathbf{x} = x\mathbf{e}_1 + y\mathbf{e}_2 = \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$$

となるので,  $(x, y)$  と書くのである.

[例題 1.2] カルテシアン座標を用いて  $(3, 2)$  で表される点について以下の問いに答えなさい.

(1) 2 つの線形独立なベクトル  $\mathbf{a}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$  と  $\mathbf{a}_2 = \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$  を基底としたとき, この点はどのように表されるか.

(2) 2 つの線形独立なベクトル  $\mathbf{b}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$  と  $\mathbf{b}_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$  を基底としたとき, この点はどのように表されるか.

上の例 (1) では,  $(\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2) = 0$  より  $\mathbf{a}_1$  と  $\mathbf{a}_2$  は直交しているが, 大きさは  $|\mathbf{a}_1| = |\mathbf{a}_2| = \sqrt{2}$  で 1 ではない. 一方例 (2) では,  $\mathbf{b}_1$  と  $\mathbf{b}_2$  は大きさも 1 ではなく直交もしていない. このように座標系を決める基底ベクトルは直交している必要も大きさが 1 である必要もない.

## 1.5 正規直交座標系

$N$  次元系で完全系を張る  $N$  個のベクトル組  $\{\mathbf{a}_i\}$  を基底ベクトルとする座標系で,

$$(\mathbf{a}_i, \mathbf{a}_j) = 0 \quad (\text{for } i \neq j) \quad (1.5)$$

を満たすとき基底ベクトルは直交していると言い, こうした座標系を直交座標系と呼ぶ.

また, 基底ベクトルが,

$$|\mathbf{a}_1| = |\mathbf{a}_2| = \dots = |\mathbf{a}_N| = 1 \quad (1.6)$$

を満たすとき, 基底ベクトルは規格化されていると言う.

基底ベクトルが直交していてなおかつ規格化されているとき特に正規直交座標系と呼ぶ. このときは,

$$(\mathbf{a}_i, \mathbf{a}_j) = \delta_{ij} \quad (1.7)$$

が成り立つ。カルテシアン座標は正規直交座標系の1つの例である。

$N$ 次元系で  $N$  個の線形独立なベクトルを用意すれば完全系を張り、任意のベクトル  $\boldsymbol{x}$  はその線形結合で式 (1.4) の形で書けることはすでに述べたが、基底ベクトル  $\{\boldsymbol{a}_i\}$  が正規直交座標系をなすとき、その結合係数  $\{\alpha_i\}$  は、

$$\alpha_i = (\boldsymbol{a}_i, \boldsymbol{x}) \quad (1.8)$$

で与えられる。

従って、基底ベクトル  $\{\boldsymbol{a}_i\}$  が正規直交座標系をなすとき任意の点  $\boldsymbol{x}$  はその線形結合で、

$$\boldsymbol{x} = \sum_{i=1}^N (\boldsymbol{a}_i, \boldsymbol{x}) \boldsymbol{a}_i \quad (1.9)$$

と表される。これらは正規直交座標系を用いる大きな利点である。

[例題 1.3] 式 (1.8) を証明しなさい。

## 1.6 グラム・シュミットの直交化

線形独立で完全系を張った基底ベクトル (従って座標系) が与えられていれば、これから規格直交した基底ベクトル (従って正規直交座標) を作ることができる。以下にその手順を示す。

規格直交化されてない線形独立な  $N$  次元基底ベクトルの組  $\{\boldsymbol{a}_i\}$  が与えられていて、これから正規直交ベクトルの組  $\{\boldsymbol{e}_i\}$  を作る事を考える。

1. 先ず、 $\boldsymbol{e}_1 = \boldsymbol{a}_1/|\boldsymbol{a}_1|$  より  $\boldsymbol{e}_1$  を作る。
2. 次に、 $\boldsymbol{a}'_2 = \boldsymbol{a}_2 - (\boldsymbol{a}_2, \boldsymbol{e}_1)\boldsymbol{e}_1$ ,  $\boldsymbol{e}_2 = \boldsymbol{a}'_2/|\boldsymbol{a}'_2|$  により  $\boldsymbol{e}_2$  を作る。
3. 同様にして、 $n$  番目まで規格直交化されていて  $n+1$  番目から  $N$  番目まで規格直交化されていないベクトルの組  $\{\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2, \dots, \boldsymbol{e}_n, \boldsymbol{a}_{n+1}, \dots, \boldsymbol{a}_N\}$  があれば、 $n+1$  番目の規格直交化された基底ベクトルは、

$$\begin{aligned} \boldsymbol{a}'_{n+1} &= \boldsymbol{a}_{n+1} - (\boldsymbol{a}_{n+1}, \boldsymbol{e}_1)\boldsymbol{e}_1 - (\boldsymbol{a}_{n+1}, \boldsymbol{e}_2)\boldsymbol{e}_2 - \dots - (\boldsymbol{a}_{n+1}, \boldsymbol{e}_n)\boldsymbol{e}_n \\ &= \boldsymbol{a}_{n+1} - \sum_{i=1}^n (\boldsymbol{a}_{n+1}, \boldsymbol{e}_i)\boldsymbol{e}_i \end{aligned} \quad (1.10)$$

$$\boldsymbol{e}_{n+1} = \boldsymbol{a}'_{n+1}/|\boldsymbol{a}'_{n+1}| \quad (1.11)$$

により求まる。

4. 3の操作を  $n+1 = N$  まで繰り返す。

こうして規格直交基底を求める方法を**グラム・シュミットの直交化**と言う。シュミットの直交化により得られる基底ベクトルは、はじめの  $\boldsymbol{a}_1$  をどれに選ぶかで異なる。

[例題 1.4] シュミットの直交化の手順3で新しく作られる基底ベクトル  $\boldsymbol{e}_{n+1}$  は  $\boldsymbol{e}_j (j \leq n)$  と直交することを示せ。

[例題 1.5] 線形独立な2つの2次元ベクトル  $\boldsymbol{a}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$ ,  $\boldsymbol{a}_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 2 \end{pmatrix}$  が与えられているとき、シュミットの直交化により規格直交した基底ベクトルの組  $\{\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2\}$  を求めよ。

[例題 1.6] 線形独立な3つの3次元ベクトル  $\boldsymbol{a}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ ,  $\boldsymbol{a}_2 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ ,  $\boldsymbol{a}_3 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$  が与えられているとき、

- (1) シュミットの直交化により規格直交した基底ベクトルの組  $\{\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2, \boldsymbol{e}_3\}$  を求めよ。
- (2) 上で求めた基底ベクトルが互いに直交していること  $((\boldsymbol{e}_i, \boldsymbol{e}_j) = \delta_{ij})$  を確かめよ。

## 1.7 ヒルベルト空間

これまでは、有限次元 ( $N$  次元) のベクトルを考えてきたが、これを無限次元に拡張したものをヒルベルト空間と呼ぶ。要素が無限個あるベクトルによって記述される空間と思えばよい。



## 2 フーリエ解析

### 2.1 フーリエ級数

ある関数を別の関数で展開する方法として、これまでにテイラー展開を学んだ。テイラー展開は与えられた関数をより簡単なべき関数 ( $x^n$ ) で展開するものである。

しかし、もとの関数が周期関数のときは、展開する関数も周期関数である方が良さそうであることは容易に想像できる。そこで、任意の周期関数を簡単な周期関数である三角関数で展開しようというのがフーリエ級数である。

#### 2.1.1 区分的に連続な関数

これから、いろいろな関数を三角関数で展開することを勉強するが、どんな関数でも展開できるわけではない。そこでこれから考える関数にある程度制約をつけることにする。

まず、**区分的に連続な関数**を定義する。「関数  $f(x)$  が定義されている区間 (定義域) を適当な有限個の区間に分けたとき、そのおのおのの内部では  $f(x)$  は連続であり、区間の端では左右の極限值が存在する」ときこの関数を区分的に連続な関数と呼ぶ。このとき、境界点での関数値に左右の極限值が一致する必要は無い (つまり境界では不連続でも良い)。

$f(x)$  とともに  $f'(x)$  も区分的に連続なとき、関数  $f(x)$  は**区分的に滑らか**であると言う。以下では区分的に滑らかな関数のみを考えることにする。

#### 2.1.2 フーリエ級数の定義

区間  $[-\pi, \pi]$  で定義され区間外では  $2\pi$  の周期性 ( $f(x) = f(x + 2\pi)$ ) を持つ関数  $f(x)$  を、三角関数の組  $\{\cos nx\}$ ,  $\{\sin nx\}$  を用いて

$$f(x) \sim \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} (a_n \cos nx + b_n \sin nx) \quad (2.1)$$

と展開することを**フーリエ級数**に展開すると言い、 $a_n (n = 1, 2, 3, \dots)$ ,  $b_n (n = 1, 2, 3, \dots)$  を**フーリエ係数**と呼ぶ。式を  $=$  でなく  $\sim$  で結ぶのは、**全ての点で等しくなるわけではないから**である。区分的に滑らかな関数の場合、連続点では  $f(x)$  とフーリエ級数は一致するが、不連続点では  $f(x)$  の定義にかかわらず、フーリエ級数は右方極限と左方極限の平均値、

$$\frac{1}{2}(f(x+0) + f(x-0)) \quad (2.2)$$

に収束する。数学的には正しくない場合もあるが、簡単のため以下では式 (2.1) を等号で結んで表記することにする。

フーリエ係数  $a_n$ ,  $b_n$  は、

$$a_n = \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} f(x) \cos nx dx \quad (n \geq 0) \quad (2.3)$$

$$b_n = \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} f(x) \sin nx dx \quad (n \geq 1) \quad (2.4)$$

で与えられる。三角関数には、

$$\int_{-\pi}^{\pi} \cos mx \cos nxdx = \pi \delta_{mn} \quad (n, m \geq 1) \quad (2.5)$$

$$\int_{-\pi}^{\pi} \sin mx \sin nxdx = \pi \delta_{mn} \quad (n, m \geq 1) \quad (2.6)$$

$$\int_{-\pi}^{\pi} \cos mx \sin nxdx = 0 \quad (n, m \geq 1) \quad (2.7)$$

の関係があるからである。

[例題 2.1 ] 式 (2.5)~(2.7) を証明せよ。

[例題 2.2 ] 式 (2.5)~(2.7) から式 (2.3) と (2.4) を証明せよ。

[例題 2.3 ] 以下の関数のフーリエ級数展開を求めなさい。

$$(1) f(x) = \begin{cases} 0 & -\pi < x \leq 0 \\ 1 & 0 < x \leq \pi \end{cases}$$

$$(2) f(x) = \begin{cases} -x & -\pi < x \leq 0 \\ x & 0 < x \leq \pi \end{cases}$$

$$(3) f(x) = \begin{cases} -1 & -\pi < x \leq 0 \\ 1 & 0 < x \leq \pi \end{cases}$$

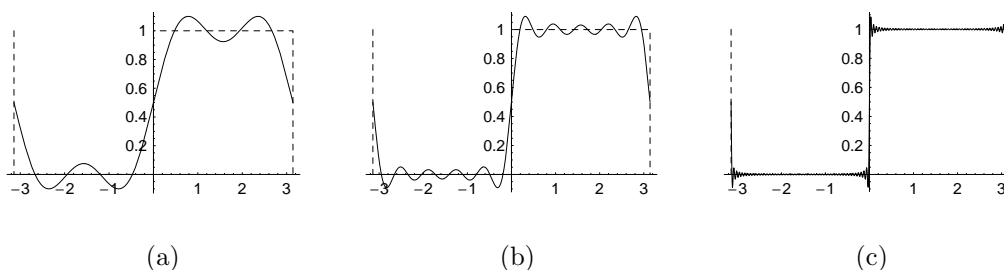
$$\text{(略解)} (1) f(x) \sim \frac{1}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n\pi} (1 - (-1)^n) \sin nx, \quad (2) f(x) = \frac{\pi}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2}{n^2\pi} ((-1)^n - 1) \cos nx,$$

$$(3) f(x) \sim \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2}{n\pi} (1 - (-1)^n) \sin nx,$$

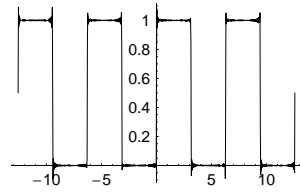
例題 2.3 の (2) は偶関数である。そのためフーリエ級数に展開したときには奇関数である  $\sin nx$  のフーリエ係数は 0 になる。同様にして (3) は奇関数なので、偶関数である  $\cos nx$  のフーリエ係数は 0 になる。

関数の対称性により、偶関数は  $\cos nx$  だけで、奇関数は  $\sin nx$  だけで展開できる。

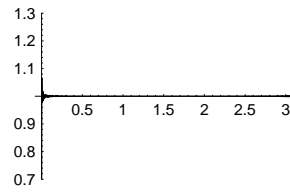
下の図は、例題 2.3(1) の関数をそれぞれ 3 次 (a), 10 次 (b), 100 次 (c) までフーリエ級数展開してプロットしたものである。次数が増えれば元の関数 (図中の破線) に近づいていくことがわかる。



また、次の図 (d) は上の図 (c) をもう少し広い範囲でプロットしたものである。フーリエ級数展開したものが周期  $2\pi$  の関数になっていることがわかる。



(d)



(e)

### 2.1.3 ギブスの現象

上の図 (e) は例題 2.3(1) の関数を 1000 次までフーリエ級数展開した結果の一部を拡大したものである。関数が連続な部分はほとんど収束しているが、 $x = \pi$  の不連続点でオーバーシュートしていることがわかる。このオーバーシュートは展開を無限次まで行っても起こり、その大きさは不連続点の飛びの大きさの 18% 程度になることが分かっている。こうした不連続点で見られるオーバーシュートもしくはアンダーシュートを**ギブスの現象**と呼ぶ。

フーリエ級数は平均してみれば元の関数に収束する (**一様収束**と呼ぶ) が、それぞれの点で見ると不連続点などでは収束しない (**各点収束しない**と言う) のである。一方、元の関数が定義域全体において連続で滑らかな場合は各点収束する。

### 2.1.4 一般区間への拡張

実際には周期が  $2\pi$  の関数ばかりではないので、**周期が  $L$  の場合に拡張**しておこう。

区間  $[-L/2, L/2]$  で定義され区間外では  $L$  の周期性 ( $f(x) = f(x+L)$ ) を持つ関数  $f(x)$  を、フーリエ級数で展開するためには、式 (2.1), (2.3), (2.4) で  $x \rightarrow \frac{2\pi}{L}x$  と変数変換すればよい。

$$f(x) \sim \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} \left( a_n \cos \frac{2\pi nx}{L} + b_n \sin \frac{2\pi nx}{L} \right) \quad (2.8)$$

ここで、

$$a_n = \frac{2}{L} \int_{-L/2}^{L/2} f(x) \cos \frac{2\pi nx}{L} dx \quad (n \geq 0) \quad (2.9)$$

$$b_n = \frac{2}{L} \int_{-L/2}^{L/2} f(x) \sin \frac{2\pi nx}{L} dx \quad (n \geq 1) \quad (2.10)$$

当然のことながら、 $L = 2\pi$  とするとそれぞれ元の式 (2.1), (2.3), (2.4) が得られる。不連続点では、元の関数値にかかわらず、

$$\frac{1}{2}(f(x+0) + f(x-0)) \quad (2.11)$$

に収束する。

[例題 2.4 ] 以下の関数のフーリエ級数展開を求めなさい。

(1)  $f(x) = x, \quad -1 < x \leq 1$

(2)  $f(x) = \begin{cases} 1+x & -1 < x \leq 0 \\ 1-x & 0 < x \leq 1 \end{cases}$

(略解) (1)  $f(x) \sim -\sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \frac{2}{n\pi} \sin n\pi x$ , (2)  $f(x) = \frac{1}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2}{n^2\pi^2} (1 - (-1)^n) \cos n\pi x$

### 2.1.5 複素フーリエ級数

区間  $[-\pi, \pi]$  で定義され区間外では  $2\pi$  の周期性を持つ関数  $f(x)$  をフーリエ級数で展開するときに,  $\{\sin nx, \cos nx\}$  を用いる代わりに  $\{e^{inx}\}$  を用いると便利な場合がある. オイラーの公式,

$$e^{inx} = \cos nx + i \sin nx \quad (2.12)$$

$$e^{-inx} = \cos nx - i \sin nx \quad (2.13)$$

より,

$$\cos nx = \frac{1}{2}(e^{inx} + e^{-inx}) \quad (2.14)$$

$$\sin nx = \frac{1}{2i}(e^{inx} - e^{-inx}) \quad (2.15)$$

となる. これを式 (2.1) に代入して整理すると,

$$f(x) \sim \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} \left[ \frac{1}{2}(a_n - ib_n)e^{inx} + \frac{1}{2}(a_n + ib_n)e^{-inx} \right] \quad (2.16)$$

となる. ここで,

$$\frac{a_0}{2} = c_0, \quad \frac{1}{2}(a_n - ib_n) = c_n, \quad \frac{1}{2}(a_n + ib_n) = c_{-n} \quad (2.17)$$

とおくと  $c_n$  と  $c_{-n}$  は複素共役 ( $c_n^* = c_{-n}$ ) で式 (2.16) は,

$$f(x) \sim \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n e^{inx} \quad (2.18)$$

ただし,

$$c_n = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} f(x) e^{-inx} dx \quad (2.19)$$

と書ける.  $n$  についての和は  $-\infty$  から  $\infty$  に変化していることに注意すること ( $\{\sin nx, \cos nx\}$  で展開する場合は  $0$  から  $\infty$  である). 式 (2.19) は,

$$\int_{-\pi}^{\pi} e^{inx} e^{-imx} dx = 2\pi \delta_{nm} \quad (2.20)$$

から導かれる.

[例題 2.5] 式 (2.20) を証明しなさい.

[例題 2.6] 式 (2.20) から, 式 (2.19) が導かれることを示しなさい.

[例題 2.7] 例題 2.3 の (1) から (2) の関数の複素フーリエ展開を求めなさい. また, それらの結果が例題 2.3 の結果と等しいことを示しなさい.

$$\text{(略解) (1) } f(x) \sim \frac{1}{2} + \sum_{\substack{n=-\infty \\ n \neq 0}}^{\infty} \frac{i}{2n\pi} ((-1)^n - 1) e^{inx}, \quad (2) f(x) = \frac{\pi}{2} + \sum_{\substack{n=-\infty \\ n \neq 0}}^{\infty} \frac{1}{n^2\pi} ((-1)^n - 1) e^{inx},$$

$$(3) f(x) \sim \sum_{\substack{n=-\infty \\ n \neq 0}}^{\infty} \frac{i}{n\pi} ((-1)^n - 1) e^{inx}$$

区間  $[-L/2, L/2]$  で定義され区間外では  $L$  の周期性を持つ関数  $f(x)$  を展開する場合に拡張すると,

$$f(x) \sim \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n e^{i \frac{2\pi n x}{L}} \quad (2.21)$$

ただし,

$$c_n = \frac{1}{L} \int_{-L/2}^{L/2} f(x) e^{-i \frac{2\pi n x}{L}} dx \quad (2.22)$$

となる.

### 2.1.6 ベクトルとの類似性と規格直交関数系

以下では、「関数  $f(x)$  と  $g(x)$  の内積  $(f(x) \cdot g(x))$ 」を

$$(f(x), g(x)) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} f(x)^* g(x) dx \quad (2.23)$$

と定義することにする. ベクトルの時と同様に, 関数  $f(x)$  と  $g(x)$  の内積  $(f(x), g(x))$  が 0 の時,  $f(x)$  と  $g(x)$  は直交していると言う. また, 関数  $f(x)$  のノルムを  $\sqrt{(f(x), f(x))}$  と定義し, ノルムが 1 のとき  $f(x)$  は規格化されているという.

内積を式 (2.23) で定義すると, 「周期  $2\pi$  を持つ任意の関数  $f(x)$  を  $e^{inx}$  でフーリエ級数展開する」ことと「無限次元のベクトル空間 (ヒルベルト空間) で, 任意の点  $\mathbf{x}$  を規格直交座標系をつくる基底ベクトル  $\mathbf{a}_n$  で展開する」ことは 1 対 1 に対応付けることができる.  $\mathbf{a}_n \leftrightarrow e^{inx}$ ,  $\mathbf{x} \leftrightarrow f(x)$  と対応づけると,

**規格直交関係**

式 (2.23) より,

$$(\mathbf{a}_m, \mathbf{a}_n) = (e^{imx}, e^{inx}) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} e^{-imx} e^{inx} dx = \delta_{mn} \quad (2.24)$$

これは式 (1.7) に対応する. このことから, 関数の組  $\{e^{inx}\}$  は正規直交座標系の基底ベクトルとみなすことができる.

### 関数の展開

また, 式 (2.21) と (2.22) より,

$$\begin{aligned} \mathbf{x} &= f(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n e^{inx} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{1}{2\pi} \left[ \int_{-\pi}^{\pi} f(x) e^{-inx} dx \right] e^{inx} \\ &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{1}{2\pi} \left[ \int_{-\pi}^{\pi} (e^{inx})^* f(x) dx \right] e^{inx} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} (e^{inx}, f(x)) e^{inx} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} (\mathbf{a}_n, \mathbf{x}) \mathbf{a}_n \end{aligned} \quad (2.25)$$

これは, 式 (1.9) に対応している. 関数の組  $\{e^{inx}\}$  は, 任意の関数を線形結合で表せることから, **完全系を張る基本ベクトル**と看做することができる.

これらのことから, **関数の組  $\{e^{inx}\}$  は完全系を張る規格直交関数系**と呼ばれる.

(注 1) 完全系を張ることを証明するのは本当は難しい. 今までの議論では, 式 (2.18) の形にかけるとしたところで完全系を張っていることを仮定してしまっているのである.

(注 2) 式 (2.23) の  $\frac{1}{2\pi}$  を重み関数と呼ぶ. これが無いと規格化が成り立たなくなる. 内積を,

$$(f(x), g(x)) = \int_{-\pi}^{\pi} f(x)^* g(x) dx \quad (2.26)$$

と定義して, 規格化定数を関数系に押し付けて  $\{\frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{inx}\}$  とする流儀もある.

(注 3) テイラー展開では, 任意の関数がべき関数系  $\{x^n\}$  の線形結合で展開できることを思い出すと, 関数系  $\{x^n\}$  も完全系を張っていることがわかる. ただし  $\{x^n\}$  は規格化も直交化もされていない.

## 2.2 フーリエ変換

フーリエ変換は物理現象の様々なところで現れる。例えば、**光の回折像はフーリエ変換で与えられる**。X線も光の一種なので得られる回折パターンはやはりフーリエ変換になっている。その他にフーリエ変換は結晶などの周期的な系の扱いを簡単にしてくれる。また、微分方程式を解く際にも役立つ。

### 2.2.1 デルタ関数

フーリエ変換の話をする前にデルタ関数の復習をしておく。十分滑らかで、かつ遠方で急速にゼロになる任意の関数  $f(x)$  に対して、

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\delta(x-x_0)dx = f(x_0) \quad (2.27)$$

となる関数を**デルタ関数**と呼ぶ。デルタ関数は通常関数として表すことはできず、適当な関数列  $\delta_n(x)$  の極限 ( $\delta(x) = \lim_{n \rightarrow \infty} \delta_n(x)$ ) で定義され、超関数と呼ばれる。上の定義から

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x-x_0)dx = 1 \quad (2.28)$$

であることはすぐ分かる。平たい言葉でいうと、**デルタ関数  $\delta(x-x_0)$  は面積が1で  $x=x_0$  に非常に鋭いピークを持つ関数である**。あるいは、クロネッカーのデルタ ( $\delta_{nm}$ ) を実数に拡張したようなものと思っても良い。

デルタ関数になる関数列はたくさん存在する。以下に証明なしでそのいくつかを載せておく。

$$1. \delta(x) = \lim_{n \rightarrow \infty} \delta_n(x), \quad \delta_n(x) = \begin{cases} n & |x| \leq 1/2n \\ 0 & |x| > 1/2n \end{cases}$$

$$2. \delta(x) = \lim_{n \rightarrow \infty} \delta_n(x) = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\sin nx}{\pi x}$$

$$3. \delta(x) = \lim_{n \rightarrow \infty} \delta_n(x) = \lim_{n \rightarrow \infty} \sqrt{\frac{n}{\pi}} e^{-nx^2}$$

[例題 2.8] 式 (2.28) を証明しなさい。

[例題 2.9] デルタ関数に関する以下の関係を証明しなさい。

$$(1) \delta(x) = \delta(-x)$$

$$(2) \delta(ax) = \frac{1}{|a|} \delta(x)$$

$$(3) \delta(x^2 - a^2) = \frac{1}{2a} \{ \delta(x - a) + \delta(x + a) \} \quad (a > 0)$$

### 2.2.2 フーリエ積分

前節までは、有限区間  $[-L/2, L/2]$  で定義された周期的関数を三角関数で展開することを考えてきたが、ここでは無限区間  $[-\infty, \infty]$  で定義される関数を展開することを考える。そのためには、 $L$  を無限大 ( $\infty$ ) にしてやればよい。そこで、

$$\frac{2\pi}{L} = \Delta k \quad (2.29)$$

と置き、式 (2.21), (2.22) を書き直すと、

$$f(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n e^{in\Delta kx} \quad (2.30)$$

$$c_n = \frac{1}{L} \int_{-L/2}^{L/2} f(x) e^{-in\Delta kx} dx \quad (2.31)$$

と書ける。\$L\$ を十分大きくとると \$\Delta k\$ は十分小さくなり、\$n\Delta k\$ は連続変数と見ることができるようになる。そこで、\$n\Delta k = k\$ として式 (2.30) の \$n\$ についての和を \$k\$ についての積分で近似することにする (\$L \to \infty\$ では両者は等しくなる)。\$n\$ がひとつ増える間に \$k\$ は \$\Delta k\$ だけ増えるので \$dn \sim \frac{dk}{\Delta k}\$ とみなせる。従って式 (2.30) の和は、

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} \rightarrow \frac{1}{\Delta k} \int_{-\infty}^{\infty} dk = \frac{L}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk \quad (2.32)$$

また、式 (2.30) 自体は、

$$f(x) = \frac{L}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} c_n e^{ikx} dk \quad (2.33)$$

と書ける。これに式 (2.31) の \$c\_n\$ を代入すると、

$$f(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \left[ \int_{-\infty}^{\infty} f(t) e^{-ikt} dt \right] e^{ikx} dk \quad (2.34)$$

となる。ここで \$k\$ についての積分を先に行い、その際 \$f(t)\$ は \$k\$ の関数ではないので外に出してやると、

$$f(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} f(t) \left[ \int_{-\infty}^{\infty} e^{ik(x-t)} dk \right] dt \quad (2.35)$$

を得る。式 (2.34) と (2.35) をフーリエ積分と呼ぶ。

デルタ関数の定義 (2.27) と式 (2.35) を比べてみると、\$\frac{1}{2\pi} \int\_{-\infty}^{\infty} e^{ik(x-t)} dk\$ がデルタ関数 \$\delta(t-x)\$ に対応していることが分かる。これもデルタ関数の表現の 1 つになっているのである。通常は、\$\delta(x) = \delta(-x)\$ の関係から指数関数の肩の符号を逆にした表現、

$$\delta(x-x_0) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ik(x-x_0)} dk \quad (2.36)$$

が良く用いられる。

### 2.2.3 フーリエ変換

式 (2.34) から次の 2 つの式が成り立つことが分かる。

$$F(k) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{-ikx} dx = \mathcal{F}\{f(x)\} \quad (2.37)$$

$$f(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} F(k) e^{ikx} dk = \mathcal{F}^{-1}\{F(k)\} \quad (2.38)$$

前者をフーリエ変換，後者を逆フーリエ変換（あるいは単にフーリエ変換）と呼ぶ．指数関数の肩の符号が逆になっていることに注意すること．

(注意)  $F(k)$  を  $\tilde{f}(k)$  と書く教科書もある．

(注意) 係数の  $1/2\pi$  を対称になるように両方で分けて，

$$F(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f(x)e^{-ikx} dx = \mathcal{F}\{f(x)\} \quad (2.39)$$

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} F(k)e^{ikx} dk = \mathcal{F}^{-1}\{F(k)\} \quad (2.40)$$

とする定義や，指数関数の肩の符号を逆にとる定義もある．また，結晶学では  $k$  の代わりに  $2\pi k$  を用いたりする．従って，専門書を読んだり公式集を見たりするときは，定義をそのつど確認する必要がある．

本講義では，式 (2.37)，(2.38) の定義を使うことにする．

式 (2.37)，(2.38) または，(2.39)，(2.40) を用いると式 (2.34) のフーリエ積分は，

$$f(x) = \mathcal{F}^{-1}\{\mathcal{F}\{f(x)\}\} \quad (2.41)$$

とかける．これは，ある関数  $f(x)$  をフーリエ変換してさらに逆フーリエ変換すると元の関数に戻ることを示す．つまり，逆フーリエ変換はフーリエ変換の逆変換となっている．

[例題 2.10] 以下の関数のフーリエ変換を求めなさい．

$$f(x) = \begin{cases} 1 & |x| \leq a \\ 0 & |x| > a \end{cases}$$

(略解)  $\frac{2 \sin ka}{k}$

[例題 2.11] 以下の問いに答えなさい．

(1) デルタ関数  $\delta(x)$  のフーリエ変換を求めなさい．

(2) (1) の結果を用いて，式 (2.36) を証明しなさい．

[例題 2.12] ガウス型関数  $f(x) = \sqrt{a/\pi}e^{-ax^2}$  のフーリエ変換を求めなさい．

(解答)

$$\begin{aligned} F(k) &= \sqrt{\frac{a}{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2} e^{-ikx} dx = \sqrt{\frac{a}{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2} (\cos kx + i \sin kx) dx \\ &= \sqrt{\frac{a}{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2} \cos kx dx = \sqrt{\frac{a}{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2} \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \frac{(kx)^{2n}}{2n!} dx \dots (*) \end{aligned}$$

$$I_n = \int_{-\infty}^{\infty} x^{2n} e^{-ax^2} dx \text{ を求める.}$$

$$\begin{aligned} I_n &= \int_{-\infty}^{\infty} x^{2n-1} \left( \frac{e^{-ax^2}}{-2a} \right)' dx = \left[ x^{2n-1} \left( \frac{e^{-ax^2}}{-2a} \right) \right] + \frac{2n-1}{2a} \int_{-\infty}^{\infty} x^{2n-2} e^{-ax^2} dx \\ &= \frac{2n-1}{2a} I_{n-1} = \frac{2n-1}{2a} \frac{2n-3}{2a} \dots \frac{3}{2a} \frac{1}{2a} I_0, \quad I_0 = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}} \end{aligned}$$

$$\therefore I_n = \frac{(2n-1)!!}{(2a)^n} \sqrt{\frac{\pi}{a}}$$

$$\begin{aligned} \sqrt{\frac{a}{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{k^{2n}}{2n!} x^{2n} e^{-ax^2} dx &= \sqrt{\frac{a}{\pi}} (-1)^n \frac{k^{2n}}{2n!} \frac{(2n-1)!!}{(2a)^n} \sqrt{\frac{\pi}{a}} \\ &= (-1)^n \frac{\cancel{(2n-1)} \cancel{(2n-3)} \dots \cancel{3} \cdot 1}{2n \cancel{(2n-2)} \cancel{(2n-4)} \dots \cancel{3} \cdot 2 \cdot 1} \frac{k^{2n}}{(2a)^n} = \frac{(-1)^n}{2n(2n-2) \dots 4 \cdot 2} \frac{k^{2n}}{(2a)^n} = \frac{(-1)^n k^{2n}}{n!(4a)^n} \end{aligned}$$



$$(*) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-)^n k^{2n}}{n!(4a)^n} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left( -\frac{k^2}{4a} \right) = e^{-k^2/4a}$$

$$\therefore F(k) = e^{-k^2/4a}$$

例題 2.11, 2.12 の結果は, 「実空間で広がりを持つ関数のフーリエ変換は, 逆空間で局在した関数になり, 実空間で局在した関数のフーリエ変換は逆空間で広がりを持つ」という教訓を与える. 特にガウス型関数のフーリエ変換はガウス型関数になるという事実は応用上重要なので記憶する事. 例題 2.12 は物理数学 II で扱う複素積分を用いるともっと簡単に証明出来る.

[例題 2.13]  $\theta(x) = \begin{cases} 0 & x < 0 \\ 1 & 0 \leq x \end{cases}$  で定義される関数  $\theta(x)$  をステップ関数と呼ぶ. 以下の問いに答えなさい.

(1)  $\theta_\epsilon(x) = \begin{cases} 0 & x < 0 \\ e^{-\epsilon x} & 0 \leq x \end{cases}$  で定義される関数  $\theta_\epsilon(x)$  によりステップ関数は,  $\theta(x) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \theta_\epsilon(x)$  と

表せることから,  $\theta(x)$  のフーリエ変換,  $\tilde{\theta}(k)$  は,  $\tilde{\theta}(k) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\epsilon + ik}$  と書けることを示せ.

(2) (1) の結果を逆フーリエ変換することでステップ関数が,  $\theta(x) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{ikx}}{\epsilon + ik} dk$  と書けることを示せ.

(3) (2) の結果から, ステップ関数の微分がデルタ関数になる ( $\frac{d\theta(x)}{dx} = \delta(x)$ ) ことを示せ. この結果は重要なので記憶しておこう.

#### 2.2.4 微分演算とフーリエ変換

関数  $f(x)$  が区間  $(-\infty, \infty)$  で定義され,  $f(x)$  と  $f'(x)$  がともに区分的に滑らかで  $|x| \rightarrow \infty$  で十分早く 0 になるとき,

$$\int_{-\infty}^{\infty} f'(x) e^{-ikx} dx = ik \int_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{-ikx} dx \quad (2.42)$$

書き換えると,

$$\mathcal{F}\{f'(x)\} = ik \mathcal{F}\{f(x)\} \quad (2.43)$$

が成り立つ. つまり導関数のフーリエ変換は元の関数のフーリエ変換に  $ik$  をかけたものになる.

同様にして,

$n$  階微分  $\frac{d^n f(x)}{dx^n} = f^{(n)}(x)$  が区分的に滑らかで  $|x| \rightarrow \infty$  で十分早く 0 になるとき,

$$\int_{-\infty}^{\infty} f^{(n)}(x) e^{-ikx} dx = (ik)^n \int_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{-ikx} dx \quad (2.44)$$

書き換えると,

$$\mathcal{F}\{f^{(n)}(x)\} = (ik)^n \mathcal{F}\{f(x)\} \quad (2.45)$$

が成り立つ. つまり  $n$  階導関数のフーリエ変換は元の関数のフーリエ変換に  $(ik)^n$  をかけたものになる.

[例題 2.14] 式 (2.42), (2.43) を証明せよ.

[例題 2.15] 式 (2.44), (2.45) を証明せよ.

### 2.2.5 たたみこみ積分

区間  $(-\infty, \infty)$  で定義される 2 つの関数,  $f(x)$ ,  $g(x)$  があるとき,

$$f * g = \int_{-\infty}^{\infty} f(x-u)g(u)du \quad (2.46)$$

で定義される  $f * g$  を関数  $f(x)$  と  $g(x)$  の **たたみこみ積分** と呼ぶ. たたみこみ積分には,

$$f * g = \int_{-\infty}^{\infty} f(x-u)g(u)du = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} F(k)G(k)e^{ikx} dk \quad (2.47)$$

の関係がある. これを書き直すと,

$$f * g = \mathcal{F}^{-1}\{F(k)G(k)\} = \mathcal{F}^{-1}\{\mathcal{F}\{f(x)\}\mathcal{F}\{g(x)\}\} \quad (2.48)$$

$$\mathcal{F}\{f * g\} = F(k)G(k) = \mathcal{F}\{f(x)\}\mathcal{F}\{g(x)\} \quad (2.49)$$

と書ける. これは, **たたみこみ積分のフーリエ変換は, フーリエ変換した関数の積になる**ことを示している.

(注意) ここで, フーリエ変換並びに逆フーリエ変換は式 (2.37), (2.38) の定義を用いた. 式 (2.39), (2.40) の定義を用いる時は, 式 (2.47) は,

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x-u)g(u)du = \int_{-\infty}^{\infty} F(k)G(k)e^{ikx} dk \quad (2.50)$$

と書ける. これに対応して, 式 (2.48), (2.49) の係数も変わってくる. また, たたみこみ積分を,

$$f * g = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f(x-u)g(u)du \quad (2.51)$$

と定義する教科書もあり, この場合も係数が変わってくる.

[例題 2.16 ] 式 (2.47) を証明しなさい.

### 2.2.6 パーセバルの関係

フーリエ変換した関数の積と元の関数の積の間には,

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x)g^*(x)dx = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} F(k)G^*(k)dk \quad (2.52)$$

の関係が成り立つ. ここで  $g^*(x)$  と  $G^*(k)$  はそれぞれ  $g(x)$  と  $G(k)$  の複素共役である. これを **パーセバルの関係** という.

特に,  $f(x) = g(x)$  の時には,

$$\int_{-\infty}^{\infty} |f(x)|^2 dx = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} |F(k)|^2 dk \quad (2.53)$$

の関係が成り立つ. また,  $g(x) = f(x)e^{ik'x}$  とすると,

$$\int_{-\infty}^{\infty} |f(x)|^2 e^{-ik'x} dx = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} F(k)F^*(k-k') dk \quad (2.54)$$

が成り立つ。これをウィナー・ヒンチンの公式と呼ぶ。

[例題 2.17] パーセバルの関係式 (2.52) を証明せよ。

[例題 2.18] ウィナー・ヒンチンの公式 (2.54) を証明せよ。

[例題 2.19] 例題 2.10 の結果を用いて、積分  $\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin^2 x}{x^2} dx$  の値を求めよ。

## 2.3 ラプラス変換

ここでは、フーリエ変換に良く似たラプラス変換を勉強する。ラプラス変換は直接物理現象と結びつくことは少ないが、ある種の微分方程式を解く際に問題を簡単にしてくれるという利点がある。この章では簡単な性質を見ていくことにする。

### 2.3.1 ラプラス変換の定義

関数  $f(x)$  に対して積分、

$$F(s) = \int_0^{\infty} f(x)e^{-sx} dx = \mathcal{L}\{f(x)\} \quad (2.55)$$

が存在するとき、 $F(s)$  を  $f(x)$  のラプラス変換と呼ぶ。ここで  $s$  は正の実数とする。

逆に  $F(s)$  が与えられて、式 (2.55) を満たす  $f(x)$  が存在するとき、 $f(x)$  を  $F(s)$  の逆ラプラス変換と呼び、

$$f(x) = \mathcal{L}^{-1}\{F(s)\} \quad (2.56)$$

と書く。定義から、ラプラス変換した関数を逆ラプラス変換すれば元に戻る。

$$f(x) = \mathcal{L}^{-1}\{\mathcal{L}\{f(x)\}\} \quad (2.57)$$

逆フーリエ変換の具体的な表式を一応与えておく。

$$f(x) = \mathcal{L}^{-1}\{F(s)\} = \frac{1}{2\pi i} \int_{\gamma-i\infty}^{\gamma+i\infty} F(s)e^{sx} ds \quad (2.58)$$

しかし、この積分を実行するためには複素関数論の知識が必要なので詳細は物理数学 II で勉強してほしい。逆ラプラス変換を直接計算できなくても様々なところで役に立つ。ラプラス変換の定義は、フーリエ変換に良く似ている。実際、多くの良く似た性質を持つ。

式 (2.55) の定義から分かるように、ラプラス変換は常に存在するわけではない。

ラプラス変換が存在する (従って積分が実行できる) ためには、十分大きな  $x$  に対して正の定数  $M$  が存在して、

$$|e^{-s_0 x} f(x)| \leq M \quad (2.59)$$

となる  $s_0$  が存在すれば、 $s > s_0$  に対してラプラス変換は存在する。

つまり  $x$  が大きいところで  $e^{sx}$  よりも発散の遅いもしくは発散しない関数にはラプラス変換が存在する。

### 2.3.2 基本的な関数のラプラス変換

以下に基本的な関数のラプラス変換を表にまとめる．これらを覚える必要は無く，必要なときに見ればよい．ただし，導けるようにしておいて欲しい．

$f(x)$	$F(s)$	制限	
$\delta(x)$	1	+ 0 に特異点	(2.60)
1	$\frac{1}{s}$	$s > 0$	(2.61)
$x^n$	$\frac{n!}{s^{n+1}}$	$s > 0$	(2.62)
$e^{ax}$	$\frac{1}{s-a}$	$s > a$	(2.63)
$xe^{ax}$	$\frac{1}{(s-a)^2}$	$s > a$	(2.64)
$\cosh ax$	$\frac{s}{s^2 - a^2}$	$s > a$	(2.65)
$\sinh ax$	$\frac{a}{s^2 - a^2}$	$s > a$	(2.66)
$\cos ax$	$\frac{s}{s^2 + a^2}$	$s > 0$	(2.67)
$\sin ax$	$\frac{a}{s^2 + a^2}$	$s > 0$	(2.68)
$e^{bx} \cos ax$	$\frac{s-b}{(s-b)^2 + a^2}$	$s > b$	(2.69)
$e^{bx} \sin ax$	$\frac{a}{(s-b)^2 + a^2}$	$s > b$	(2.70)
$x \cos ax$	$\frac{s^2 - b^2}{(s^2 + a^2)^2}$	$s > 0$	(2.71)
$x \sin ax$	$\frac{2as}{(s^2 + a^2)^2}$	$s > 0$	(2.72)

[例題 2.20] 式 (2.60), (2.61), (2.63), (2.65)-(2.68) を証明しなさい．

### 2.3.3 ラプラス変換の性質

ラプラス変換は以下の性質を持つ．

線形性	$\mathcal{L}\{af(x) + bg(x)\} = a\mathcal{L}\{f(x)\} + b\mathcal{L}\{g(x)\}$	(2.73)
相似性	$\mathcal{L}\{f(\lambda x)\} = \frac{1}{\lambda}F(s/\lambda)$	(2.74)
代入	$\mathcal{L}\{e^{-ax}f(x)\} = F(s+a)$	(2.75)
並進	$\mathcal{L}\{f(x-a)\} = e^{-as}F(s)$	(2.76)
微分の変換 I	$\mathcal{L}\{f'(x)\} = s\{f(x)\} - f(0) = sF(s) - f(0) \quad (s > 0)$	(2.77)
微分の変換 II	$\mathcal{L}\{f''(x)\} = s^2\{f(x)\} - sf(0) - f'(0) = s^2F(s) - sf(0) - f'(0) \quad (s > 0)$	(2.78)
変換の微分	$\frac{d^n F(s)}{ds^n} = F^{(n)}(s) = \mathcal{L}\{(-x)^n f(x)\}$	(2.79)
変換の積分	$\int_s^\infty F(t)dt = \mathcal{L}\left\{\frac{f(x)}{x}\right\}$	(2.80)

これらも覚える必要は無く、必要なときに見ればよい。ただし、導けるようにしておいて欲しい。

[例題 2.21 ] 式 (2.73)~(2.80) を証明しなさい。

[例題 2.22 ] 式 (2.75) から式 (2.69), (2.70) を証明しなさい。

[例題 2.23 ] 式 (2.79) から式 (2.62), (2.64), (2.71), (2.72) を証明しなさい。

#### 2.3.4 たたみこみ積分

関数  $f(x)$ ,  $g(x)$  のたたみこみ積分  $f * g$  を,

$$f * g = \int_0^{\infty} f(x-u)g(u)du \quad (2.81)$$

により定義すると,

$$\mathcal{L}\{f * g\} = \mathcal{L}\left\{\int_0^{\infty} f(x-u)g(u)du\right\} = F(s)G(s) = \mathcal{L}\{f(x)\}\mathcal{L}\{g(x)\} \quad (2.82)$$

の関係が成り立つ。つまり、2つの関数のたたみこみ積分のラプラス変換は、それぞれの関数のラプラス変換の積に等しい。

[例題 2.24 ] 式 (2.82) を証明しなさい。

### 3 直交多項式としての特殊関数

#### 3.1 $\Gamma$ 関数と $B$ 関数

##### 3.1.1 $\Gamma$ 関数

$x > 0$  のとき,

$$\Gamma(x) = \int_0^{\infty} e^{-t} t^{x-1} dt \quad (3.1)$$

で定義される関数を  $\Gamma$ (ガンマ) 関数と呼ぶ.

$\Gamma$  関数は,

$$\Gamma(x+1) = x\Gamma(x) \quad (3.2)$$

の性質を持つ. 特に  $x$  が整数  $n$  のときは,

$$\Gamma(n+1) = n! \quad (3.3)$$

となる. このことから  $\Gamma$  関数は階乗 ( $n!$ ) を実数に拡張したものと考えることが出来る. その他の代表的な関数値としては,  $\Gamma(1) = 1$ ,  $\Gamma(1/2) = \sqrt{\pi}$  などがある.

[例題 3.1] 式 (3.2) を証明しなさい.

[例題 3.2]  $\Gamma(1) = 1$ ,  $\Gamma(1/2) = \sqrt{\pi}$  を示しなさい.

$x < 0$  のときは, 式 (3.2) を用いて,  $x+n > 0$  となる  $n$  により,

$$\Gamma(x) = \frac{\Gamma(x+n)}{x(x+1)\dots(x+n-1)} \quad (3.4)$$

と定義する. 定義から  $x$  が負の整数のときは発散する.

#### スターリング (Stirling) の公式

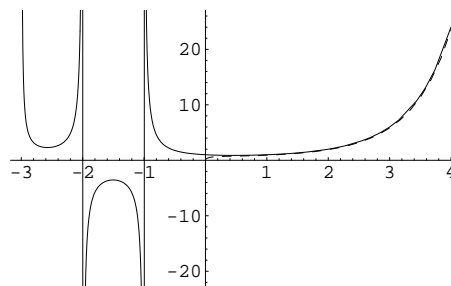
$x$  が十分大きいときは, 以下の公式が成り立つ.

$$\Gamma(x+1) \simeq \sqrt{2\pi x} x^x e^{-x} \quad (3.5)$$

$$\log \Gamma(x+1) \simeq x \log x - x + \log \sqrt{2\pi x} \simeq x \log x - x \quad (3.6)$$

これをスターリングの公式と呼ぶ. 証明は難しいので省略するが, 統計力学でしばしば出てくる.

右の図は,  $\Gamma(x+1)$  を区間  $(-3, 4)$  でプロットしたものである. 同時に,  $\sqrt{2\pi x} x^x e^{-x}$  も区間  $(0, 4)$  でプロットした.  $\Gamma(x+1)$  が  $\sqrt{2\pi x} x^x e^{-x}$  で良く近似できることが分かる.



### 3.1.2 B 関数

$x > 0, y > 0$  の時,

$$B(x, y) = \int_0^1 t^{x-1}(1-t)^{y-1} dt \quad (3.7)$$

で定義される関数を  $B$ (ベータ) 関数と呼ぶ.

$B$  関数は  $\Gamma$  関数を用いて,

$$B(x, y) = \frac{\Gamma(x)\Gamma(y)}{\Gamma(x+y)} \quad (3.8)$$

と書き表すことが出来る.

[例題 3.3] 式 (3.8) を証明しなさい.

## 3.2 直交多項式の一般論

### 3.2.1 直交多項式の定義

ある関数  $f(x)$  が  $x$  のべき乗の線形結合により,

$$f(x) = a_0 + a_1x + \cdots + a_{n-1}x^{n-1} + a_nx^n \quad (3.9)$$

と書けるとき,  $f(x)$  を  $x$  についての多項式と呼ぶ. また, 最大のべき数をこの多項式の次数とよぶ. 上の例では次数  $n$  である.

区間  $[a, b]$  で正である重み関数  $w(x)$  を用いて内積を,

$$(f(x), g(x)) = \int_a^b w(x)f^*(x)g(x)dx \quad (3.10)$$

で定義することにする. 内積が 0 となるとき, 関数  $f(x)$  と  $g(x)$  は直交するという.

$n$  次の多項式  $\phi_n(x)$  が,

$$\phi_n(x) = \sum_{k=0}^n a_k^n x^k = a_0^n + a_1^n x + \cdots + a_{n-1}^n x^{n-1} + a_n^n x^n \quad (3.11)$$

と書けたとする. ここで  $a_k^n$  は  $n$  次の多項式の  $k$  次の (線形結合) 係数を表す ( $a_k$  の  $n$  乗ではないことに注意すること). 多項式の組  $\{\phi_n(x)\} = \{\phi_0(x), \phi_1(x), \phi_2(x), \dots\}$  が,

$$(\phi_m(x), \phi_n(x)) = \int_a^b w(x)\phi_m^*(x)\phi_n(x)dx = \delta_{mn}w_n \quad (3.12)$$

を満たすとき,  $\{\phi_n(x)\}$  を直交多項式と呼ぶ. ここで,  $\phi_m^*(x)$  は  $\phi_m(x)$  の複素共役である. 特に,  $w_n = 1$  の時, 正規直交多項式と呼ぶ.

(注) 直交多項式であれば,  $w_n$  を多項式の定義に押し付ける (つまり  $\phi_n(x)/\sqrt{w_n}$  を改めて  $\phi_n(x)$  と定義して規格化すること) でいつでも正規直交多項式に変換することが出来る. しかし, 特殊関数と呼ばれる一連の直交多項式の定義は歴史的な理由で規格化されていない場合がある.

(注) この講義では、実関数しか扱わないので式 (3.12) で  $\phi_m^*(x) = \phi_m(x)$  であるが、後々のためこのように定義しておく。

直交多項式は、重み関数を与えられればシュミットの直交化によりべきの関数列  $\{1, x, x^2, x^3, \dots\}$  を直交化することで求められる。

[例題 3.4] 区間  $[-1, 1]$  で重み関数  $w(x) = 1$  である直交多項式を関数列  $\{1, x, x^2, x^3\}$  からシュミットの直交化により 3 次まで求めよ。

$n$  次の直交多項式は  $x^m (m \leq n-1)$  と直交する。すなわち、

$$\int_a^b w(x) \phi_n(x) x^m dx = 0 \quad (0 \leq m \leq n-1) \quad (3.13)$$

[例題 3.5] 式 (3.13) を証明せよ。

### 3.2.2 一意性

$w(x)$  が区間  $[a, b]$  で定義された非負の実関数で、任意の整数  $n$  に対して、 $\int_a^b w(x) x^n dx$  が存在するとき、式 (3.11) で定義され直交関係 (3.12) を満たす直交多項式は、最大次数の係数  $a_n^n$  を与えれば唯一に定まる。直交多項式は定数倍しても直交するので係数をどれか 1 つ決める必要があるのである。

### 3.2.3 漸化式

全ての直交多項式には、

$$\phi_n(x) = (\alpha_n x - \beta_n) \phi_{n-1}(x) - \gamma_n \phi_{n-2}(x) \quad (3.14)$$

という形の 3 項間漸化式が成り立つ。ここで、

$$\begin{aligned} \alpha_n &= \frac{a_n^n}{a_{n-1}^{n-1}} \\ \beta_n &= \alpha_n \frac{(x \phi_{n-1}(x), \phi_{n-1}(x))}{(\phi_{n-1}(x), \phi_{n-1}(x))} \\ \gamma_n &= \frac{\alpha_n (\phi_{n-1}(x), \phi_{n-1}(x))}{\alpha_{n-1} (\phi_{n-2}(x), \phi_{n-2}(x))} \end{aligned} \quad (3.15)$$

である。

(証明)

$\phi_n(x)$  と  $\phi_{n-1}(x)$  はそれぞれ、

$$\phi_n(x) = a_0^n + a_1^n x + \dots + a_{n-1}^n x^{n-1} + a_n^n x^n$$

$$\phi_{n-1}(x) = a_0^{n-1} + a_1^{n-1} x + \dots + a_{n-1}^{n-1} x^{n-1}$$

と書ける。そこで、 $\phi_n(x) - x \frac{a_n^n}{a_{n-1}^{n-1}} \phi_{n-1}(x)$  は高々  $n-1$  次の多項式となる。従って  $n-1$  次までの  $\phi_k(x)$  で展開できて、

$$\phi_n(x) - x \frac{a_n^n}{a_{n-1}^{n-1}} \phi_{n-1}(x) = \sum_{k=0}^{n-1} b_k \phi_k(x) \quad (3.16)$$



と書ける. これと  $\phi_j(x)$  ( $j \leq n-3$ ) との内積をとると,

$$\left( \phi_n(x) - x \frac{a_n^n}{a_{n-1}^{n-1}} \phi_{n-1}(x), \phi_j(x) \right) = b_j(\phi_j(x), \phi_j(x)) \quad (3.17)$$

この式の左辺はさらに,

$$\frac{a_n^n}{a_{n-1}^{n-1}} (x\phi_{n-1}(x), \phi_j(x)) = \frac{a_n^n}{a_{n-1}^{n-1}} (\phi_{n-1}(x), x\phi_j(x)) \quad (3.18)$$

となるが,  $x\phi_j(x)$  は高々  $n-2$  次の多項式であるため 0 である. 従って, 式 (3.17) から,

$$b_j = 0 \quad (j \leq n-3) \quad (3.19)$$

となる. 従って, 式 (3.16) で左辺の和は  $k = n-1, n-2$  の項だけが生き残って,

$$\phi_n(x) - x \frac{a_n^n}{a_{n-1}^{n-1}} \phi_{n-1}(x) = b_{n-1} \phi_{n-1}(x) + b_{n-2} \phi_{n-2}(x) \quad (3.20)$$

となる. ここで,

$$\alpha_n = a_n^n / a_{n-1}^{n-1}, \quad \beta_n = -b_{n-1}, \quad \gamma_n = b_{n-2} \quad (3.21)$$

とおくと,

$$\phi_n(x) = (\alpha_n x - \beta_n) \phi_{n-1}(x) - \gamma_n \phi_{n-2}(x) \quad (3.22)$$

と書けることが分かる. これではまだ,  $b_{n-1}$  と  $b_{n-2}$  したがって,  $\beta_n$  と  $\gamma_n$  が未知数なので次にこれを求める.

まず, 式 (3.22) と  $\phi_{n-1}(x)$  の内積をとると,

$$0 = \alpha_n (x\phi_{n-1}(x), \phi_{n-1}(x)) - \beta_n (\phi_{n-1}(x), \phi_{n-1}(x))$$

より,

$$\beta_n = \alpha_n \frac{(x\phi_{n-1}(x), \phi_{n-1}(x))}{(\phi_{n-1}(x), \phi_{n-1}(x))} \quad (3.23)$$

が求まる. 次に, 式 (3.22) と  $\phi_{n-2}(x)$  の内積をとると,

$$0 = \alpha_n (x\phi_{n-1}(x), \phi_{n-2}(x)) - \gamma_n (\phi_{n-2}(x), \phi_{n-2}(x))$$

これから,

$$\gamma_n = \alpha_n \frac{(x\phi_{n-1}(x), \phi_{n-2}(x))}{(\phi_{n-2}(x), \phi_{n-2}(x))} \quad (3.24)$$

ここで右辺の分子は,

$$\begin{aligned} (x\phi_{n-1}(x), \phi_{n-2}(x)) &= (\phi_{n-1}(x), x\phi_{n-2}(x)) = (\phi_{n-1}(x), a_{n-2}^{n-2} x^{n-1} + \dots) \\ &= \frac{a_{n-2}^{n-2}}{a_{n-1}^{n-1}} (\phi_{n-1}(x), a_{n-1}^{n-1} x^{n-1} + \dots) = \frac{a_{n-2}^{n-2}}{a_{n-1}^{n-1}} (\phi_{n-1}(x), a_{n-1}^{n-1} x^{n-1}) \end{aligned} \quad (3.25)$$

$\phi_{n-1}(x)$  は,  $\phi_{n-1}(x) = a_{n-1}^{n-1} x^{n-1} + \sum_{k=0}^{n-2} a_k^{n-1} x^k$  と書けるので,

$$a_{n-1}^{n-1} x^{n-1} = \phi_{n-1}(x) - \sum_{k=0}^{n-2} a_k^{n-1} x^k$$

となり, これを式 (3.25) に代入すると,

$$(x\phi_{n-1}(x), \phi_{n-2}(x)) = \frac{a_{n-2}^{n-2}}{a_{n-1}^{n-1}} \left( \phi_{n-1}(x), \phi_{n-1}(x) - \sum_{k=0}^{n-2} a_k^{n-1} x^k \right) = \frac{a_{n-2}^{n-2}}{a_{n-1}^{n-1}} (\phi_{n-1}(x), \phi_{n-1}(x))$$

これを式 (3.24) に代入すると,

$$\gamma_n = \frac{\alpha_n}{a_{n-1}^{n-1}} \frac{(\phi_{n-1}(x), \phi_{n-1}(x))}{(\phi_{n-2}(x), \phi_{n-2}(x))} \quad (3.26)$$

と  $\gamma_n$  が求まる.

[例題 3.6] 式 (3.14), (3.15) より, 重み関数が  $w(x) = 1$  で, 区間  $[-1, 1]$  で定義され最大次数の係数  $a_n^n$  が 1 である直交多項式を求めよ.

### 3.2.4 ロドリゲ (Rodrigues) の公式

$$\phi_n(x) = \frac{c_n}{w(x)} \frac{d^n G_n(x)}{dx^n} \quad (3.27)$$

で定義される関数を考える. ただし  $G_n^{(k)}(a) = G_n^{(k)}(b) = 0$  とし,  $G_n^{(k)}(x)$  は  $G_n(x)$  の  $k$  階導関数とする (ここまでは,  $\phi_n(x)$  は多項式とは限らないことに注意). このとき, 関数  $\phi_n(x)$  は  $n-1$  次以下の多項式と直交する. 式 (3.27) をロドリゲの公式と呼ぶ.

[例題 3.7] 上記を証明せよ.

式 (3.27) を満たし,  $\phi_n(x)$  が  $n$  次の多項式となる, 従って,

$$\frac{d^{n+1}}{dx^{n+1}} \frac{c_n}{w(x)} \frac{d^n G_n(x)}{dx^n} = 0 \quad (3.28)$$

を満たす  $G_n(x)$  を見つければ  $w(x)$  を重み関数とする直交多項式  $\{\phi_n(x)\}$  を作ることが出来る.

これまでに, 我々は直交多項式を求める 3 つの方法すなわち,

1. シュミットの直交化による方法
2. 漸化式による方法
3. ロドリゲの公式による方法

を知った.

### 3.2.5 グルサ (Goursat) 型積分表示

以下の話は複素関数論を勉強しないと完全には理解できないので, 物理数学 II で複素関数論を勉強した後に思い出してほしい. しかし, 一部の結果を飲み込んでしまうと直交多項式の重要な関係式を理解できる.

#### グルサ (Goursat) の定理

複素関数  $f(z)$  が正則な関数とすると, その  $n$  回微分  $f^{(n)}(z)$  は積分,

$$f^{(n)}(z) = \frac{n!}{2\pi i} \oint_C \frac{f(t)}{(t-z)^{n+1}} dt \quad (3.29)$$

で与えられる. ここで  $C$  は  $t = z$  を正の向きに一周する任意の閉曲線である.

直交多項式がロドリゲ公式 (3.27) で定義される時, グルサの定理を適用すると,

$$\phi_n(z) = \frac{n!}{2\pi i} \oint_C \frac{G_n(t)}{w(z)(t-z)^{n+1}} dt \quad (3.30)$$

と書ける. これを直交多項式のグルサ型積分表示とよぶ.

### 3.3 有限区間の直交多項式

ここでは、有限区間  $[a, b]$  で定義される直交多項式を考える。有限区間は一般性を失うことなく  $[-1, 1]$  に限定できる。適当に変数変換することで区間  $[a, b]$  に変換できるからである。区間  $[-1, 1]$  で定義された直交多項式で良く用いられるのはヤコビ (Jacobi) 多項式である。後で分かるようにルジャンドル (Legendre) 多項式やチェビシェフ (Chebyshev) 多項式はヤコビ多項式の特殊な場合である。

(注) ヤコビ多項式を区間  $[0, 1]$  で定義する場合もある。

#### 3.3.1 ヤコビ (Jacobi) 多項式

ヤコビ多項式  $\{P_n^{(\alpha, \beta)}(x)\}$  は**重み関数**が  $w(x) = (1-x)^\alpha(1+x)^\beta$  で、区間  $[-1, 1]$  で定義される直交多項式で、ロドリゲの公式により、

$$\begin{aligned} P_n^{(\alpha, \beta)}(x) &= \frac{(-)^n}{2^n n!} \frac{1}{w(x)} D^n [w(x)(1-x^2)^n], \\ &= \frac{(-)^n}{2^n n!} (1-x)^{-\alpha} (1+x)^{-\beta} D^n [(1-x)^{n+\alpha} (1+x)^{n+\beta}], \end{aligned} \quad (3.31)$$

と定義される。ただし、 $D = \frac{d}{dx}$  である。また、以下の性質を持つ。

直交関係

$$\int_{-1}^1 w(x) P_n^{(\alpha, \beta)}(x) P_m^{(\alpha, \beta)}(x) dx = w_n \delta_{nm}, \quad (3.32)$$

ここで、

$$w_n = \frac{2^{\alpha+\beta+1}}{2n+\alpha+\beta+1} \frac{\Gamma(n+\alpha+1)\Gamma(n+\beta+1)}{n!\Gamma(n+\alpha+\beta+1)}. \quad (3.33)$$

漸化式

$$\begin{aligned} &2(n+1)(n+\alpha+\beta+1)(2n+\alpha+\beta)P_{n+1}^{(\alpha, \beta)}(x) \\ &= (2n+\alpha+\beta+1)\{(2n+\alpha+\beta)(2n+\alpha+\beta+2)x + (\alpha^2 - \beta^2)\}P_n^{(\alpha, \beta)}(x) \\ &\quad - 2(n+\alpha)(n+\beta)(2n+\alpha+\beta+2)P_{n-1}^{(\alpha, \beta)}(x) \end{aligned} \quad (3.34)$$

ただし、

$$P_0^{(\alpha, \beta)}(x) = 1, \quad P_1^{(\alpha, \beta)}(x) = \frac{1}{2} \{(\alpha + \beta + 2)x + (\alpha - \beta)\} \quad (3.35)$$

#### 3.3.2 ゲーゲンバウア (Gegenbauer) 多項式

ゲーゲンバウア多項式  $\{C_n^\lambda(x)\}$  は、係数は別としてヤコビ多項式において  $\alpha = \beta = \lambda - 1/2$  と置いた特殊な場合で、**重み関数**は  $w(x) = (1-x^2)^{\lambda-1/2}$  でありヤコビ多項式により、

$$C_n^\lambda(x) = \frac{\Gamma(\lambda + \frac{1}{2})\Gamma(n+2\lambda)}{\Gamma(2\lambda)\Gamma(n+\lambda+\frac{1}{2})} P_n^{(\lambda-1/2, \lambda-1/2)}(x) \quad (3.36)$$

と定義できる。あるいは、ロドリゲ公式により直接、

$$C_n^\lambda(x) = \frac{(-)^n \Gamma(\lambda + \frac{1}{2}) \Gamma(n + 2\lambda)}{2^n n! \Gamma(2\lambda) \Gamma(n + \lambda + \frac{1}{2})} \frac{1}{w(x)} D^n [w(x)(1-x^2)^n] \quad (3.37)$$

と定義される。ゲーゲンバウア多項式は以下の性質を持つ。

### 直交関係

$$\int_{-1}^1 w(x) C_n^{\lambda*}(x) C_m^\lambda(x) dx = \frac{\pi 2^{1-2\lambda} \Gamma(n+2\lambda)}{n!(\lambda+n)\Gamma^2(\lambda)} \delta_{nm} \quad (3.38)$$

### 漸化式

$$(n+1)C_{n+1}^\lambda(x) = 2(\lambda+n)x C_n^\lambda(x) - (2\lambda+n-1)C_{n-1}^\lambda(x) \quad (3.39)$$

ただし,

$$C_0^\lambda(x) = 1, \quad C_1^\lambda(x) = 2\lambda x \quad (3.40)$$

### 3.3.3 ルジャンドル (Legendre) 多項式

ルジャンドル多項式  $P_n(x)$  は重み関数  $w(x) = 1$  に対応する区間  $[-1, 1]$  で定義された直交多項式で、ヤコビ多項式において  $\alpha = \beta = 0$ , ゲーゲンバウア多項式において  $\nu = 1/2$  とおいた特殊な場合である。すなわち,

$$P_n(x) = P_n^{(0,0)}(x) = C_n^{1/2}(x), \quad (3.41)$$

あるいは、ロドリゲの公式により,

$$P_n(x) = \frac{(-)^n}{2^n n!} D^n [(1-x^2)^n], \quad (3.42)$$

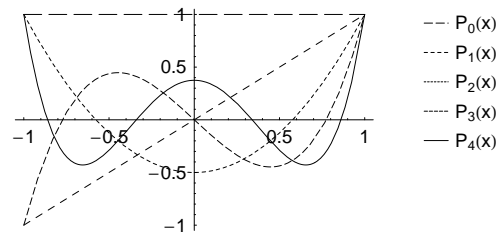
と定義される。式 (3.42) を展開すると,

$$P_n(x) = \frac{1}{2^n} \sum_{m=0}^{\lfloor \frac{n}{2} \rfloor} \frac{(-)^m (2n-2m)!}{m!(n-m)!(n-2m)!} x^{n-2m} \quad (3.43)$$

と書ける。ここで、 $\lfloor x \rfloor$  はガウスの記号で  $x$  を超えない最大の整数を表す。従って  $\lfloor n/2 \rfloor$  は、 $n$  が偶数の時は  $n/2$ ,  $n$  が奇数の時は  $(n-1)/2$  である。式 (3.43) より、 $P_n(x)$  は  $n$  が奇数のとき奇関数となり、 $n$  が偶数のとき偶関数となることが分かる。

右に 4 次までのルジャンドル多項式のグラフを示す。証明は省略するがグラフから、 $n$  次のルジャンドル多項式は  $n$  個の零点を持つことが分かる。

さらに、 $n$  次多項式の  $n$  個の零点は、 $n+1$  次多項式の  $n+1$  個の零点の間に位置することも分かる。これらのことは、ルジャンドル多項式に限らず直交多項式に一般的に言えることである。



[例題 3.8] 展開式 (3.43) を証明せよ.

ルジャンドル多項式は以下の性質を持つ.

直交関係

$$\int_{-1}^1 P_m^*(x)P_n(x)dx = \frac{2}{2n+1}\delta_{nm}, \quad (3.44)$$

[例題 3.9] 直交関係 (3.44) を証明せよ.

漸化式

$$(n+1)P_{n+1}(x) = (2n+1)xP_n(x) - nP_{n-1}(x), \quad (3.45)$$

ここで,  $P_0(x) = 1$ ,  $P_1(x) = x$ .

[例題 3.10] 漸化式 (3.45) を証明せよ.

母関数

ルジャンドル多項式は, 関数  $1/\sqrt{1-2xt+t^2}$  を  $t$  の関数として  $t=0$  のまわりにテイラー展開したときの展開係数となる. すなわち,

$$\frac{1}{\sqrt{1-2xt+t^2}} = \sum_{n=0}^{\infty} P_n(x)t^n \quad (3.46)$$

このとき,  $1/\sqrt{1-2xt+t^2}$  をルジャンドル関数の母関数と呼ぶ.

[例題 3.11] 式 (3.46) を証明せよ.

(解答)

$f(x) = \frac{1}{\sqrt{1-x}}$  を  $x=1$  の周りにテイラー展開する.  $f(x)$  の  $n$  次導関数は,

$$f^{(n)}(x) = \frac{(2n)!}{2^{2n}n!}(1-x)^{-\frac{1}{2}-n} \text{ で与えられる.}$$

$\therefore f^{(0)}(x) = (1-x)^{-\frac{1}{2}}$ ,  $f^{(1)}(x) = \frac{1}{2}(1-x)^{-\frac{3}{2}}$  より  $n=0, 1$  の時に成り立つ.  $n=k$  の時に成り立つと仮定すると,

$$\begin{aligned} f^{(k+1)}(x) &= \frac{d}{dx} \frac{(2k)!}{2^{2k}k!}(1-x)^{-\frac{1}{2}-k} = -\frac{(2k)!}{2^{2k}k!} \left(-\frac{1}{2}-k\right) (1-x)^{-\frac{1}{2}-(k+1)} \\ &= \frac{(2k)!}{2^{2k}k!} \frac{2k+1}{2} (1-x)^{-\frac{1}{2}-(k+1)} = \frac{(2k)!}{2^{2k}k!} \frac{(2k+2)(2k+1)}{2(2k+2)} (1-x)^{-\frac{1}{2}-(k+1)} \\ &= \frac{(2(k+1))!}{2^{2(k+1)}(k+1)!} (1-x)^{-\frac{1}{2}-(k+1)} \end{aligned}$$

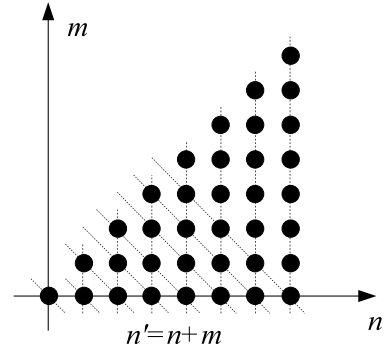
より,  $n=k+1$  の時も成り立つ. よって数学的帰納法により成立. 従って,  $f(x)$  は,

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{1-x}} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(2n)!}{2^{2n}(n!)^2} x^n \text{ とテイラー展開できる. } x \text{ の代わりに } 2xt-t^2 \text{ を代入すると,}$$

$$\begin{aligned} \frac{1}{\sqrt{1-2xt+t^2}} &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(2n)!}{2^{2n}(n!)^2} (2xt-t^2)^n = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(2n)!}{2^{2n}(n!)^2} t^n (2x-t)^n \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(2n)!}{2^{2n}(n!)^2} t^n \sum_{m=0}^n {}_n C_m (2x)^{n-m} (-t)^m = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(2n)!}{2^{2n}(n!)^2} t^n \sum_{m=0}^n (-)^m \frac{n!}{m!(n-m)!} (2x)^{n-m} (-t)^m \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^n \frac{(-)^m (2n)!}{2^{2n}n!m!(n-m)!} (2x)^{n-m} t^{n+m} - (*) \end{aligned}$$

$n + m = n'$  が一定になる様に和の順番を変更すると,

$$\begin{aligned}
 (*) &= \sum_{n'=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\lfloor \frac{n'}{2} \rfloor} \frac{(-)^m (2n' - 2m)!}{2^{2(n'-m)} (n' - m)! m! (n' - 2m)!} (2x)^{n'-2m} t^{n'} \\
 &= \sum_{n'=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\lfloor \frac{n'}{2} \rfloor} \frac{(-)^m (2n' - 2m)!}{2^{n'} (n' - m)! m! (n' - 2m)!} x^{n'-2m} t^{n'} \\
 &= \sum_{n'=0}^{\infty} P_{n'}(x) t^{n'}
 \end{aligned}$$



[例題 3.12] 式 (3.46) をロドリゲ公式 (3.42) にグルサの定理 (3.29) を適用することで証明せよ.

[例題 3.13] 母関数 (3.46) を用いて, 漸化式 (3.45) を証明せよ.

### クーロン・ポテンシャルへの応用

右図のように  $z = a$  の点に点電荷  $q$  を置いたときに, 球座標で  $(r, \theta, \varphi)$  で与えられる点に出来るポテンシャルを  $\phi$  とすると,  $\phi$  は図の距離  $r_1$  を用いて,

$$\phi = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q}{r_1} \quad (3.47)$$

とかける.  $r_1$  は余弦定理より,  $r_1 = \sqrt{r^2 - 2ar \cos \theta + a^2}$  と書けるので,

$$\phi = \frac{q}{4\pi\epsilon_0 r} \frac{1}{\sqrt{1 - 2\frac{a}{r} \cos \theta + \left(\frac{a}{r}\right)^2}} \quad (3.48)$$

となる. これと母関数の展開式 (3.46) を比較すると, ポテンシャル  $\phi$  はルジャンドル多項式を用いて,

$$\phi = \frac{q}{4\pi\epsilon_0 r} \sum_{n=0}^{\infty} P_n(\cos \theta) \left(\frac{a}{r}\right)^n \quad (3.49)$$

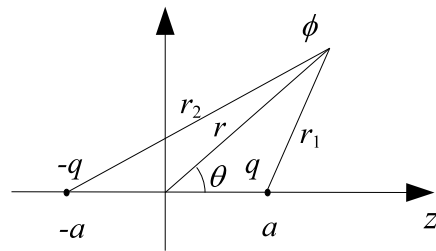
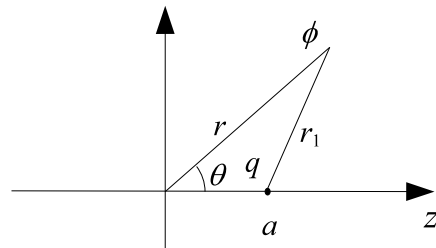
と展開できることが分かる. 次に,  $z = a$  に電荷  $q$  を,  $z = -a$  に電荷  $-q$  を置いたときに球座標で  $(r, \theta, \varphi)$  で与えられる点に出来るポテンシャルを  $\phi$  と考える. 重ね合わせの原理により  $\phi$  は,

$$\phi = \frac{q}{4\pi\epsilon_0} \left( \frac{1}{r_1} - \frac{1}{r_2} \right) \quad (3.50)$$

で与えられる. これはさらに,

$$\begin{aligned}
 \phi &= \frac{q}{4\pi\epsilon_0 r} \left\{ \sum_{n=0}^{\infty} P_n(\cos \theta) \left(\frac{a}{r}\right)^n - \sum_{n=0}^{\infty} P_n(\cos \theta) \left(-\frac{a}{r}\right)^n \right\} = \frac{2q}{4\pi\epsilon_0 r} \sum_{n=0}^{\infty} P_{2n+1}(\cos \theta) \left(\frac{a}{r}\right)^{2n+1} \\
 &= \frac{2q}{4\pi\epsilon_0 r} \left[ P_1(\cos \theta) \frac{a}{r} + P_3(\cos \theta) \left(\frac{a}{r}\right)^3 + \dots \right] \quad (3.51)
 \end{aligned}$$

と書き直せる. これは電気双極子の作るポテンシャルを表し, 電気双極子の作るポテンシャルはルジャンドル多項式で展開できることを示す. これを電磁気学では多重極展開と呼ぶ.



### 3.3.4 チェビシエフ (Chebyshev) 多項式

チェビシエフ多項式  $\{T_n(x)\}$  は、区間  $[-1, 1]$  において重み関数  $w(x) = 1/\sqrt{1-x^2}$  に対応した多項式で、ヤコビ多項式  $\{P_n^{(\alpha, \beta)}(x)\}$  において  $\alpha = \beta = -1/2$  とした特別な場合である。あるいは、ゲーゲンバウア多項式  $\{C_n^\lambda(x)\}$  で  $\lambda \rightarrow 0$  とした極限で、

$$T_n(x) = \frac{2^{2n}(n!)^2}{(2n)!} P_n^{(-1/2, -1/2)}(x) = \frac{n}{2} \lim_{\lambda \rightarrow 0} \Gamma(\lambda) C_n^\lambda(x) \quad (3.52)$$

と定義できる。また、ロドリゲの公式から直接、

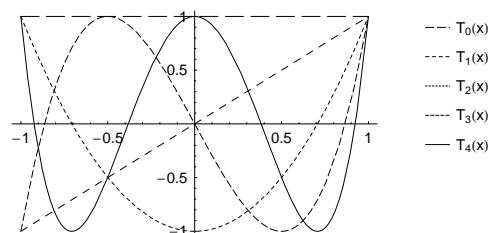
$$T_n(x) = \frac{(-1)^n}{(2n-1)!!} \frac{1}{w(x)} D^n [w(x)(1-x^2)^n], \quad w(x) = \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} \quad (3.53)$$

と定義される。式 (3.53) を展開すると具体的な展開式として、

$$T_n(x) = \frac{n}{2} \sum_{m=0}^{\lfloor \frac{n}{2} \rfloor} \frac{(-1)^m (n-m-1)!}{m!(n-2m)!} (2x)^{n-2m} \quad (3.54)$$

と書ける。ここで、 $[x]$  はガウスの記号で  $x$  を超えない最大の整数を表す。従って  $[n/2]$  は、 $n$  が偶数の時は  $n/2$ 、 $n$  が奇数の時は  $(n-1)/2$  である。式 (3.54) より、 $T_n(x)$  は  $n$  が奇数のとき奇関数となり、 $n$  が偶数のとき偶関数となることが分かる。

右に 4 次までのチェビシエフ多項式のグラフを示す。ルジャンドル多項式の時と同様に、 $n$  次のチェビシエフ多項式は  $n$  個の零点を持つことが分かる。さらに、 $n$  次多項式の  $n$  個の零点は、 $n+1$  次多項式の  $n+1$  個の零点の間に位置することも分かる。



[例題 3.14] 展開式 (3.54) を証明せよ。

チェビシエフ多項式は以下の性質を持つ。

#### 直交関係

$$\int_{-1}^1 w(x) T_m^*(x) T_n(x) dx = w_n \delta_{nm}, \quad w_n = \begin{cases} \pi & n = 0 \\ \pi/2 & n \geq 1 \end{cases} \quad (3.55)$$

[例題 3.15] 直交関係 (3.55) を証明せよ。

#### 漸化式

$$T_{n+1}(x) = 2xT_n(x) - T_{n-1}(x), \quad (3.56)$$

ここで、 $T_0(x) = 1$ ,  $T_1(x) = x$ .

[例題 3.16] 漸化式 (3.56) を証明せよ。

## 母関数

チェビシェフ多項式は、関数  $\frac{1-t^2}{\sqrt{1-2xt+t^2}}$  を  $t$  の関数として  $t=0$  のまわりにテイラー展開したときの展開係数となる。すなわち、

$$\frac{1-t^2}{\sqrt{1-2xt+t^2}} = T_0(x) + 2 \sum_{n=1}^{\infty} T_n(x)t^n \quad (3.57)$$

このとき、 $\frac{1-t^2}{\sqrt{1-2xt+t^2}}$  をチェビシェフ関数の母関数と呼ぶ。

[例題 3.17 ] 式 (3.57) を証明せよ。

[例題 3.18 ] 式 (3.57) をロドリゲ公式 (3.53) にグルサの定理 (3.29) を適用することで証明せよ。

## 有用な公式

チェビシェフ多項式には上記以外に有用な公式として、

$$T_n(\cos \theta) = \cos n\theta \quad (3.58)$$

がある。これを利用すると様々な公式が初等的に求めることが出来る。さらにド・モアブルの定理  $((\cos \theta + i \sin \theta)^n = \cos n\theta + i \sin n\theta)$  を用いると、

$$T_n(x) = \frac{1}{2} \left[ (x + i\sqrt{1-x^2})^n + (x - i\sqrt{1-x^2})^n \right] \quad (3.59)$$

が直ちに導ける。

[例題 3.19 ] 公式 (3.58) を証明せよ。

チェビシェフ多項式が物理で直接表に出てくることは少ない。しかし、関数を多項式で展開して近似する際には最大の誤差が最も小さい多項式であることが知られている。そのため数値計算では良く用いられる。計算機で  $\sin$  や  $\cos$  を計算するときも、実は計算機の中ではチェビシェフ多項式で多項式展開した近似式を計算しているのである。そのため、我々は気づかないところでお世話になっているのだ。

## 3.4 半無限区間での直交多項式

### 3.4.1 ソニン (Sonine) の多項式

ここでは、区間  $[0, \infty]$  で直交する多項式を考える。ヤコビ多項式の類推から、区間  $[a, b]$  の直交多項式は、

$$\phi_n(x) = K_n \frac{1}{w(x)} D^n [w(x)(x-a)^n(x-b)^n], \quad w(x) = (x-a)^\alpha(x-b)^\beta \quad (3.60)$$

という形のロドリゲの公式で作ることができる。従って、区間  $[0, \infty]$  の直交多項式を作るためには、 $a \rightarrow 0$ ,  $b \rightarrow \infty$  といったスケール変換をしてやれば良いと思われる。この変換は、ヤコビ多項式では  $x \rightarrow 1 - 2x/\beta$  として  $\beta$  が  $\infty$  の極限をとればよい。

$$S_n^\alpha(x) = \lim_{\beta \rightarrow \infty} P_n^{(\alpha, \beta)} \left( 1 - \frac{2x}{\beta} \right) \quad (3.61)$$

で定義される多項式  $\{S_n^\alpha(x)\}$  をソニンの多項式と呼ぶ。これをロドリゲの公式で書くと、



$$S_n^\alpha(x) = \frac{1}{n!} \frac{1}{w(x)} D^n [w(x)x^n], \quad w(x) = e^{-x}x^\alpha \quad (3.62)$$

となる.

[例題 3.20] 式 (3.61) から式 (3.62) を導け.

式 (3.62) からソニン多項式の展開式,

$$S_n^\alpha(x) = \sum_{k=0}^n \frac{(-)^k (n+\alpha)!}{(n-k)! (\alpha+k)! k!} x^k \quad (3.63)$$

が得られる. ソニン多項式は, 以下の性質を持つ.

**直交関係**

$$\int_0^\infty w(x) S_m^{\alpha*}(x) S_n^\alpha(x) dx = \frac{(n+\alpha)!}{n!} \delta_{nm} \quad (3.64)$$

[例題 3.21] 直交関係 (3.64) を証明せよ.

**漸化式**

$$(n+1)S_{n+1}^\alpha(x) = (2n+\alpha+1-x)S_n^\alpha(x) - (n+\alpha)S_{n-1}^\alpha(x), \quad S_0^\alpha(x) = 1, \quad S_1^\alpha(x) = \alpha+1-x \quad (3.65)$$

[例題 3.22] 漸化式 (3.65) を証明せよ.

**母関数**

$$\frac{\exp\left[\frac{xz}{z-1}\right]}{(1-z)^{\alpha+1}} = \sum_{n=0}^{\infty} S_n^\alpha(x) z^n \quad (3.66)$$

[例題 3.23] 式 (3.66) を証明せよ.

(注) ここで定義したソニン多項式をラゲール陪多項式と呼ぶこともあるので, 注意が必要である. 例えば Mathematica の組み込み関数である LaguerreL[] がそうである. ラゲール多項式は他にも幾つか異なる定義がある.

### 3.4.2 ラゲール (Laguerre) の陪多項式

ソニンの多項式により,

$$L_n^m(x) = (-)^m n! S_{n-m}^m(x) \quad (3.67)$$

で定義される  $n-m$  次の多項式をラゲールの陪多項式と呼ぶ. これをロドリゲの公式を用いて直接書くと,

$$L_n^m(x) = (-)^m \frac{n!}{(n-m)!} \frac{1}{w(x)} D^{n-m}[w(x)x^{n-m}], \quad w(x) = e^{-x}x^m \quad (3.68)$$

となる. 式 (3.68) を展開すると,

$$L_n^m(x) = (-)^m n! \sum_{k=0}^{n-m} (-)^k \frac{n!}{(n-m-k)!(m+k)!k!} x^k \quad (3.69)$$

となる. ラゲールの陪多項式は以下の性質を持つ.

**直交関係**

$$\int_0^\infty w(x) L_n^{m*}(x) L_l^m(x) dx = \frac{(n!)^3}{(n-m)!} \delta_{nl} \quad (3.70)$$

[例題 3.24] ソニンの多項式の直交関係 (3.64) からラゲール陪多項式の直交関係 (3.70) を導け.

**漸化式**

$$\begin{aligned} (n+1-m)L_{n+1}^m(x) &= (n+1)(2n-m+1-x)L_n^m(x) - n^2 L_{n-1}^m(x), \\ L_m^m(x) &= (-)^m m!, \quad L_{m+1}^m(x) = (-)^m (m+1)!(m+1-x) \end{aligned} \quad (3.71)$$

[例題 3.25] ソニン多項式の漸化式 (3.65) からラゲール陪多項式の漸化式 (3.71) を導け.

**母関数**

$$(-)^m \frac{\exp\left[-\frac{xz}{1-z}\right]}{(1-z)^{m+1}} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(n+m)!} L_{n+m}^m(x) z^n \quad (3.72)$$

[例題 3.26] 式 (3.66) から式 (3.72) を導け.

### 3.4.3 ラゲール (Laguerre) の多項式

ラゲールの陪多項式で特に  $m=0$  としたものをラゲールの多項式とよび  $\{L_n(x)\}$  と書く, すなわち,

$$L_n(x) = L_n^0(x) \quad (3.73)$$

ロドリゲスの公式で表すと,

$$L_n(x) = \frac{1}{w(x)} D^n[w(x)x^n], \quad w(x) = e^{-x} \quad (3.74)$$

となり, 具体的な展開式は,

$$L_n(x) = n! \sum_{k=0}^n \frac{(-)^k n!}{(n-k)!k!k!} x^k \quad (3.75)$$

である。これと式 (3.69) を比べるとラゲール陪多項式はラゲールの多項式を用いて、

$$L_n^m(x) = \left(\frac{d}{dx}\right)^m L_n(x) \quad (3.76)$$

と書けることが分かる。ラゲールの多項式は以下の性質を持つ。これらはラゲールの陪多項式で  $m = 0$  とおけばすぐに求まる。

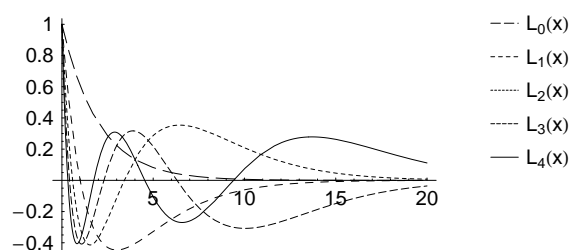
#### 直交関係

$$\int_0^\infty w(x)L_n^*(x)L_l(x) = (n!)^2\delta_{nl} \quad (3.77)$$

#### 漸化式

$$L_{n+1}(x) = (2n+1-x)L_n(x) - n^2L_{n-1}(x), \quad L_0(x) = 1, \quad L_1(x) = 1-x \quad (3.78)$$

右の図は、ラゲールの多項式をノルムが1になるように規格化した関数  $(e^{-1/2x}L_n(x)/n!)$  をプロットしたものである。 $n$  次のラゲール多項式は  $n$  個の零点を持つことが分かる。



#### 3.4.4 水素原子の波動関数

水素原子についてシュレディンガー方程式を解くと、主量子数が  $n$  で角運動量子数が  $l$  である電子軌道の波動関数の動径方向成分  $R_n^l(r)$  は、ボーア半径を  $a_B$  とすると、

$$R_n^l(r) \propto e^{-\rho/2} \rho^l L_{n-l}^{2l+1}(\rho), \quad \rho = \frac{2r}{na_B} \quad (3.79)$$

となる。

#### 3.5 無限区間の直交多項式～エルミート (Hermite) 多項式

ここでは、無限区間  $[-\infty, \infty]$  で直交する多項式を考える。ソニン多項式の時と同様に、区間  $[-\infty, \infty]$  で直交する多項式を作るためには、式 (3.60) で  $a \rightarrow -\infty$ ,  $b \rightarrow \infty$  といったスケール変換をしてやれば良いと思われる。この変換は、ヤコビ多項式では  $\alpha = \beta$ ,  $x \rightarrow x/\sqrt{\alpha}$  として  $\alpha$  が  $\infty$  の極限をとればよい。

$$H_n(x) = \lim_{\alpha \rightarrow \infty} 2^n n! \alpha^{-n/2} P_n^{(\alpha, \alpha)}\left(\frac{x}{\sqrt{\alpha}}\right) \quad (3.80)$$

で定義される多項式  $\{H_n(x)\}$  をエルミートの多項式と呼ぶ。これをロドリゲの公式で書くと、

$$H_n(x) = (-1)^n \frac{1}{w(x)} D^n [w(x)], \quad w(x) = e^{-x^2} \quad (3.81)$$

となる。

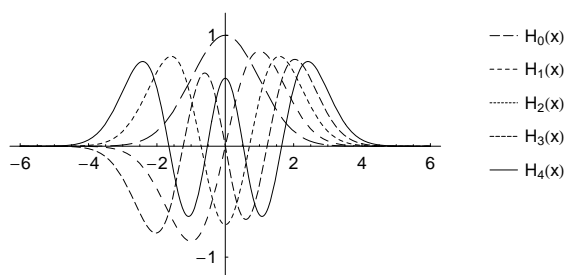
(注) 上の重み関数を  $w(x) = e^{-x^2/2}$  としてエルミート多項式を定義することもある。定義が変われば以下の式も当然変わってくるので、文献を読むときには定義を確認する必要がある。

[例題 3.27] 式 (3.80) から式 (3.81) を導け。

式 (3.81) からエルミート多項式の展開式,

$$H_n(x) = \sum_{m=0}^{\lfloor \frac{n}{2} \rfloor} (-1)^m \frac{n!}{m!(n-2m)!} (2x)^{n-2m} \quad (3.82)$$

が得られる。この式から、奇数次のエルミート多項式は奇関数となり、偶数次のエルミート多項式は偶関数になることがわかる。右図はエルミート多項式をノルムが1になるように規格化した関数  $(e^{-1/2x^2} H_n(x) / \sqrt{2^n n!})$  をプロットしたものである。この関数は調和振動子に対応するシュレディンガー方程式を解いたときの波動関数になっている。



[例題 3.28] 式 (3.82) を証明せよ。

エルミート多項式は、以下の性質を持つ。

**直交関係**

$$\int_{-\infty}^{\infty} w(x) H_m^*(x) H_n(x) dx = 2^n n! \sqrt{\pi} \delta_{mn} \quad (3.83)$$

[例題 3.29] 直交関係 (3.83) を証明せよ。

**漸化式**

$$H_{n+1}(x) = 2xH_n(x) - 2nH_{n-1}(x), \quad H_0(x) = 1, \quad H_1 = 2x \quad (3.84)$$

[例題 3.30] 漸化式 (3.84) を証明せよ。

**母関数**

$$e^{2xt-t^2} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} H_n(x) t^n \quad (3.85)$$

[例題 3.31] 式 (3.85) を証明せよ。

## 4 微分方程式と特殊関数

### 4.1 自己随伴演算子

以下では線型 2 階の常微分方程式を考える。線型 2 階常微分方程式の一般形は、

$$p_0(x) \frac{d^2}{dx^2} u(x) + p_1(x) \frac{d}{dx} u(x) + p_2(x) u(x) = \left[ p_0(x) \frac{d^2}{dx^2} + p_1(x) \frac{d}{dx} + p_2(x) \right] u(x) = \mathcal{L}u(x) = 0 \quad (4.1)$$

で与えられる。演算子  $\mathcal{L}$  に対して随伴演算子  $\bar{\mathcal{L}}$  を、

$$\bar{\mathcal{L}} = \frac{d^2}{dx^2} p_0(x) - \frac{d}{dx} p_1(x) + p_2(x) \quad (4.2)$$

と定義する。 $\bar{\mathcal{L}}$  は、

$$\bar{\mathcal{L}} = p_0(x) \frac{d^2}{dx^2} + (2p_0'(x) - p_1(x)) \frac{d}{dx} + (p_0''(x) - p_1'(x) + p_2(x)) \quad (4.3)$$

と書き直せるので、 $\mathcal{L} = \bar{\mathcal{L}}$  となるためには、 $2p_0'(x) - p_1(x) = p_1(x)$ 、 $p_0''(x) - p_1'(x) + p_2(x) = p_2(x)$  従って、

$$p_0'(x) = p_1(x) \quad (4.4)$$

であれば、 $\mathcal{L} = \bar{\mathcal{L}}$  を満たす。このような演算子を**自己随伴演算子**と呼ぶ。 $p_0(x) = p(x)$ 、 $p_2(x) = q(x)$  と書くことにすると、式 (4.1) は、

$$\mathcal{L}u(x) = \bar{\mathcal{L}}u(x) = \frac{d}{dx} \left[ p(x) \frac{du(x)}{dx} \right] + q(x)u(x) \quad (4.5)$$

と書き直せる。

自己随伴型でない演算子は  $\frac{1}{p_0(x)} \exp \left[ \int^x \frac{p_1(t)}{p_0(t)} dt \right]$  を書けることで自己随伴型演算子に変換できる。

(証明)

$$\begin{aligned} & \frac{1}{p_0(x)} \exp \left[ \int^x \frac{p_1(t)}{p_0(t)} dt \right] \mathcal{L}u(x) \\ &= \exp \left[ \int^x \frac{p_1(t)}{p_0(t)} dt \right] u''(x) + \frac{p_1(x)}{p_0(x)} \exp \left[ \int^x \frac{p_1(t)}{p_0(t)} dt \right] u'(x) + \frac{p_2(x)}{p_0(x)} \exp \left[ \int^x \frac{p_1(t)}{p_0(t)} dt \right] u(x) \end{aligned}$$

ここで、 $\frac{d}{dx} \left\{ \exp \left[ \int^x \frac{p_1(t)}{p_0(t)} dt \right] u'(x) \right\} = \exp \left[ \int^x \frac{p_1(t)}{p_0(t)} dt \right] u''(x) + \frac{p_1(x)}{p_0(x)} \exp \left[ \int^x \frac{p_1(t)}{p_0(t)} dt \right] u'(x)$  より

$$\frac{1}{p_0(x)} \exp \left[ \int^x \frac{p_1(t)}{p_0(t)} dt \right] \mathcal{L}u(x) = \frac{d}{dx} \left\{ \exp \left[ \int^x \frac{p_1(t)}{p_0(t)} dt \right] \frac{du(x)}{dx} \right\} + \frac{p_2(x)}{p_0(x)} \exp \left[ \int^x \frac{p_1(t)}{p_0(t)} dt \right] u(x)$$

これは、明らかに自己随伴形式である。

## 4.2 スツルム・リウヴィル (Sturm-Liouville) 型微分方程式

区間  $[a, b]$  で  $p(x)$ ,  $q(x)$ ,  $w(x)$  が  $x$  の実数値連続関数で  $p(x) > 0$ ,  $w(x) > 0$  としたときに, 自己随伴形式で,

$$\frac{d}{dx} \left[ p(x) \frac{du(x)}{dx} \right] + q(x)u(x) + \lambda_n w(x)u(x) = 0 \quad (4.6)$$

と書かれる微分方程式を **スツルム・リウヴィル型微分方程式** と呼ぶ. ここで,  $\lambda_n$  は定数である. これは 2 階の常微分方程式であるから解を決めるためには 2 つの境界条件が必要になる.  $A_1, A_2, B_1, B_2$  を実数の定数とするとき,

$$\begin{cases} A_1 u(a) + A_2 u'(a) = 0 \\ B_1 u(b) + B_2 u'(b) = 0 \end{cases} \quad (4.7)$$

と書かれる境界条件を **正則境界条件** と呼ぶ. 正則境界条件の下でスツルム・リウヴィル微分方程式を満たす解を求める問題を **スツルム・リウヴィル型固有値問題** と呼ぶ. このとき,  $\lambda_n$  は **勝手な値を取ることはできず, 境界条件により値が決まる**. この  $\lambda_n$  を **固有値** と呼ぶ. スツルム・リウヴィル型固有値問題は 2 つの重要な性質を持つ.

定理 4.1

スツルム・リウヴィル型固有値問題の固有値は実数である.

[例題 4.1] 定理 4.1 を証明せよ.

定理 4.2

スツルム・リウヴィル型固有値問題の解 (固有関数値) は区間  $[a, b]$  で重み関数を  $w(x)$  として直交する. すなわち 2 つの異なる解を  $u_1(x)$ ,  $u_2(x)$  とすると,

$$\int_a^b w(x) u_1^*(x) u_2(x) dx = 0 \quad (4.8)$$

である.

[例題 4.2] 定理 4.2 を証明せよ.

## 4.3 行列との対応

自己随伴演算子  $\mathcal{L}$  に対応するスツルム・リウヴィル固有値問題の 2 つの固有関数を  $u(x)$ ,  $v(x)$  とすると,

$$\int_a^b v^*(x) \mathcal{L}u(x) dx = \int_a^b u(x) \mathcal{L}v^*(x) dx \quad (4.9)$$

が成り立つ.

[例題 4.3] 式 (4.9) を証明せよ.

積分  $\int_a^b f^*(x)g(x)dx$  を  $(f, g)$  と書くことにすると, 式 (4.9) は,

$$(v, \mathcal{L}u) = (\bar{\mathcal{L}}v, u) = (\mathcal{L}v, u)$$

が成り立つことを示している. 一方, 線型代数を思い出すと, 行列  $A$  がエルミート行列であれば, 任意の 2 つのベクトル  $v$ ,  $u$  に対して,

$$(v, Au) = ({}^t A^* v, u) = (Av, u)$$

が成り立つ。このことから,

$$A \leftrightarrow \mathcal{L} \quad A = {}^t A^* \leftrightarrow \mathcal{L} = \bar{\mathcal{L}}$$

という対応関係が見て取れる。また、「エルミート行列の固有値は実数である」ことと定理 4.1 が、「エルミート行列の固有ベクトルは直交する」ことと定理 4.2 が対応する。

#### 4.4 直交多項式が満足する微分方程式

前節で扱った直交多項式は全てロドリゲスの公式により,

$$\phi_n(x) = \frac{1}{K_n} \frac{1}{w(x)} D^n [w(x)X(x)^n] \quad (4.10)$$

という形で与えられることがわかる。ここで  $X(x)$  はただか  $x$  についての 2 次多項式である。

式 (4.10) で与えられる直交多項式は、微分方程式,

$$\begin{aligned} X(x) \frac{d^2 u}{dx^2} + K_1 \phi_1(x) \frac{du}{dx} + \lambda_n u &= 0 \\ \lambda_n &= -n(K_1 a_1^1 + \frac{n-1}{2} X''(x)) \end{aligned} \quad (4.11)$$

を満たす。ここで  $a_1^1$  は  $\phi_1(x)$  の  $x$  の係数である。これに  $w(x)$  をかけると  $K_1 \phi_1(x)w(x) = D[w(x)X(x)]$  より,

$$\frac{d}{dx} \left[ w(x)X(x) \frac{du}{dx} \right] + \lambda_n w(x)u = 0 \quad (4.12)$$

と自己随伴形式に書き換えることができる。直交多項式は、スツルム・リウヴィル型微分方程式の解になっていることから重み関数を  $w(x)$  とする直交関数系であることが分かる。

[例題 4.4] 式 (4.11) を証明せよ。

(解答)

$$D^{n+1} [XD[wX^n]] = \sum_{k=0}^{n+1} C_k D^k [X] D^{n+1-k} [D[wX^n]]$$

ここで  $k$  についての和は、0, 1, 2 のみ ( $\because X$  は 2 次式)

$$\begin{aligned} &= XD^{n+2} [wX^n] + (n+1)X'D^{n+1} [wX^n] + \frac{(n+1)n}{2} X''D^n [wX^n] \\ &= XD^2 \cdot D^n [wX^n] + (n+1)X'D \cdot D^n [wX^n] + \frac{(n+1)n}{2} X''D^n [wX^n] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} &D^n [wX^n] = K_n w \phi_n \text{ より,} \\ &= K_n \left\{ XD^2 [w \phi_n] + (n+1)X'D [w \phi_n] + \frac{(n+1)n}{2} X''w \phi_n \right\} - (1) \end{aligned}$$

一方,

$$D^{n+1} [XD[wX^n]] = D^{n+1} [XD[wX \cdot X^{n-1}]] = D^{n+1} [X^n D[wX] + (n-1)X^n wX']$$

$$D[wX] = K_1 w \phi_1 \text{ より,}$$

$$= D^{n+1} [X^n K_1 w \phi_1 + (n-1)X^n wX'] = D^{n+1} [\{K_1 \phi_1 + (n-1)X'\}wX^n]$$

$$= \sum_{k=0}^{n+1} C_k D^k [K_1 \phi_1 + (n-1)X'] D^{n+1-k} [wX^n]$$

ここで残るのは  $k=0, 1$  の項のみなので,

$$= \{K_1 \phi_1 + (n-1)X'\} D^{n+1} [wX^n] + (n+1)\{K_1 \phi_1' + (n-1)X''\} D^n [wX^n]$$

$$\begin{aligned}
& D^n[wX^n] = K_n w\phi_n \text{ より,} \\
& = K_n \{ \{K_1\phi_1 + (n-1)X'\} D[w\phi_n] + (n+1)\{K_1\phi_1' + (n-1)X''\} w\phi_n \} - (2) \\
& (1)=(2) \text{ より,} \\
& XD^2[w\phi_n] + (2X' - K_1\phi_1)D[w\phi_n] - (n+1) \left( K_1\phi_1' + \frac{n-2}{2}X'' \right) w\phi_n = 0 \\
& D[w\phi_n] = w\phi_n' + w'\phi_n, \quad D^2[w\phi_n] = w\phi_n'' + 2w'\phi_n' + w''\phi_n \text{ を代入して整理すると,} \\
& wX\phi_n'' + (2w'X + 2wX' - K_1w\phi_1)\phi_n' \\
& + \left[ w''X + 2w'X' - K_1w'\phi_1 - (n+1) \left( K_1\phi_1' + \frac{n-2}{2}X'' \right) w \right] \phi_n = 0 \\
& K_1w\phi_1 = wX' + w'X, \quad K_1(w'\phi_1 + w\phi_1) = w''X + 2w'X' + wX'' \text{ より,} \\
& X \frac{d^2}{dx^2}\phi_n + K_1\phi_1 \frac{d}{dx}\phi_n + \lambda_n\phi_n = 0, \quad \lambda_n = -n \left\{ K_1\phi_1' + \frac{n-1}{2}X'' \right\} = -n \left\{ K_1a_1' + \frac{n-1}{2}X'' \right\} \\
& \text{ここで } \lambda_n \text{ は定数.}
\end{aligned}$$

### ヤコビの微分方程式

ヤコビ多項式  $\{P_n^{\alpha,\beta}(x)\}$  は以下の微分方程式を満たす.

$$(1-x^2)\frac{d^2u}{dx^2} + \{\beta - \alpha - (\alpha + \beta + 2)x\} \frac{du}{dx} + n(n + \alpha + \beta + 1)u = 0 \quad (4.13)$$

自己随伴形式で書くと,

$$\frac{d}{dx} \left[ (1-x)^{\alpha+1}(1+x)^{\beta+1} \frac{du}{dx} \right] + n(n + \alpha + \beta + 1)(1-x)^\alpha(1+x)^\beta u = 0 \quad (4.14)$$

### ルジャンドルの微分方程式

ルジャンドル多項式  $\{P_n(x)\}$  は以下の微分方程式を満たす.

$$(1-x^2)\frac{d^2u}{dx^2} - 2x\frac{du}{dx} + n(n+1)u = 0 \quad (4.15)$$

自己随伴形式で書くと,

$$\frac{d}{dx} \left[ (1-x^2) \frac{du}{dx} \right] + n(n+1)u = 0 \quad (4.16)$$

### チェビシェフの微分方程式

チェビシェフ多項式  $\{T_n(x)\}$  は以下の微分方程式を満たす.

$$(1-x^2)\frac{d^2u}{dx^2} - x\frac{du}{dx} + n^2u = 0 \quad (4.17)$$

自己随伴形式で書くと,

$$\frac{d}{dx} \left[ \sqrt{1-x^2} \frac{du}{dx} \right] + \frac{n^2}{\sqrt{1-x^2}} u = 0 \quad (4.18)$$

### ソニンの微分方程式



ソニン多項式  $\{S_n^\alpha(x)\}$  は以下の微分方程式を満たす。

$$x \frac{d^2 u}{dx^2} + (\alpha + 1 - x) \frac{du}{dx} + nu = 0 \quad (4.19)$$

自己随伴形式で書くと、

$$\frac{d}{dx} \left[ e^{-x} x^{\alpha+1} \frac{du}{dx} \right] + ne^{-x} x^\alpha u = 0 \quad (4.20)$$

#### ラゲールの陪微分方程式

ラゲール多項式  $\{L_n^m(x)\}$  は以下の微分方程式を満たす。

$$x \frac{d^2 u}{dx^2} + (m + 1 - x) \frac{du}{dx} + (n - m)u = 0 \quad (4.21)$$

自己随伴形式で書くと、

$$\frac{d}{dx} \left[ e^{-x} x^{m+1} \frac{du}{dx} \right] + (n - m)e^{-x} x^m u = 0 \quad (4.22)$$

#### エルミートの微分方程式

エルミート多項式  $\{H_n(x)\}$  は以下の微分方程式を満たす。

$$\frac{d^2 u}{dx^2} - 2x \frac{du}{dx} + 2nu = 0 \quad (4.23)$$

自己随伴形式で書くと、

$$\frac{d}{dx} \left[ e^{-x^2} \frac{du}{dx} \right] + 2ne^{-x^2} u = 0 \quad (4.24)$$

## 4.5 昇降演算子と漸化式

### 4.5.1 昇降演算子の一般式

2階微分方程式が、

$$\mathcal{L}u = p_0(x) \frac{d^2 u}{dx^2} + p_1(x) \frac{du}{dx} + p_2(x)u = 0 \quad (4.25)$$

と与えられ、その解が  $u(n, x)$  と書けたとする。  $\mathcal{L}u = 0$  が、

$$\begin{aligned} \mathcal{L}u(n, x) &= \left[ \tilde{f}(n, x) \frac{d}{dx} + \tilde{g}(n, x) \right] \left[ f(n, x) \frac{d}{dx} + g(n, x) \right] u(n, x) \\ &+ c(n)u(n, x) \end{aligned} \quad (4.26)$$

$$\begin{aligned} &= \left[ f(n \pm l, x) \frac{d}{dx} + g(n \pm l, x) \right] \left[ \tilde{f}(n \pm l, x) \frac{d}{dx} + \tilde{g}(n \pm l, x) \right] u(n, x) \\ &+ c(n \pm l)u(n, x) \end{aligned} \quad (4.27)$$

と2通りに因子分解できる時、

$$\begin{cases} T = f(n, x) \frac{d}{dx} + g(n, x) \\ \tilde{T} = \tilde{f}(n \pm l, x) \frac{d}{dx} + \tilde{g}(n \pm l, x) \end{cases} \quad (4.28)$$

と置くと,

$$\begin{cases} Tu(n, x) = \lambda_n u(n \mp l, x) \\ \tilde{T}u(n, x) = \tilde{\lambda}_n u(n \pm l, x) \end{cases} \quad (4.29)$$

となる. ここで  $\lambda_n, \tilde{\lambda}_n$  は  $u(n, x)$  の定義によって決まる定数である. この  $T, \tilde{T}$  を  $\pm$  の符号に応じて, プラスのとき階差  $l$  の上昇演算子, マイナスのとき階差  $l$  の下降演算子, 両方を合わせて昇降演算子と呼ぶ. (証明)

式 (4.26) に左から  $T$  を作用させると,

$$\left[ f(n, x) \frac{d}{dx} + g(n, x) \right] \left[ \tilde{f}(n, x) \frac{d}{dx} + \tilde{g}(n, x) \right] Tu(n, x) + c(n)Tu(n, x) = 0 \quad (4.30)$$

式 (4.27) で  $n$  を  $n \mp l$  に置き換えると,

$$\left[ f(n, x) \frac{d}{dx} + g(n, x) \right] \left[ \tilde{f}(n, x) \frac{d}{dx} + \tilde{g}(n, x) \right] u(n \mp l, x) + c(n)u(n \mp l, x) = 0 \quad (4.31)$$

両式を比較すると,

$$Tu(n, x) \propto u(n \mp l, x) \quad (4.32)$$

となる.  $\tilde{T}u(n, x) \propto u(n \pm l, x)$  についても同様に証明できる. 等号にならないのは定数倍した関数は同じ線形の微分方程式を満たすためである.

#### 4.5.2 昇降演算子の求め方

微分方程式,  $\mathcal{L}u = p_0(x) \frac{d^2 u}{dx^2} + p_1(x) \frac{du}{dx} + p_2(x)u = 0$  が,

$$\mathcal{L}u = \left( \tilde{f} \frac{d}{dx} + \tilde{g} \right) \left( f \frac{d}{dx} + g \right) u + cu$$

と書き直せるとすると,

$$\mathcal{L}u = \tilde{f}f \frac{d^2 u}{dx^2} + \left( \tilde{f}g + \tilde{g}f + \tilde{f} \frac{df}{dx} \right) \frac{du}{dx} + \left( \tilde{g}g + \tilde{f} \frac{dg}{dx} \right) u$$

より,

$$\begin{cases} \tilde{f}f = p_0 \\ \tilde{f}g + \tilde{g}f + \tilde{f} \frac{df}{dx} = p_1 \\ \tilde{g}g + \tilde{f} \frac{dg}{dx} = p_2 - c \end{cases}$$

でなければならない.  $f$  を適当に選んだとすると,  $\tilde{f} = p_0/f$ . また, 2番目と3番目の式から,

$$\tilde{g} = \frac{1}{f} \left\{ p_1 - \frac{p_0}{f} \left( g + \frac{df}{dx} \right) \right\}$$

これを3番目の式に代入すると,  $g$  は Riccati の微分方程式,

$$\frac{dg}{dx} - \frac{g^2}{f} + \left( \frac{p_1}{p_0} - \frac{1}{f} \frac{df}{dx} \right) g = \frac{p_2 - c}{p_0} \quad (4.33)$$

を満足しなければいけない.  $G = g/f$  とするとこれは,

$$\frac{dG}{dx} - G^2 + \frac{p_1}{p_0} G = \frac{p_2 - c}{p_0} \quad (4.34)$$

と書き直せる. 3章で勉強した全ての直交多項式にはこうした昇降演算子が存在する.

### 4.5.3 ルジャンドル多項式の昇降演算子

ルジャンドル多項式  $\{P_n(x)\}$  の満たす微分方程式 (4.15) の両辺に  $1 - x^2$  をかけたもの、

$$(1 - x^2)^2 \frac{d^2 u}{dx^2} - 2x(1 - x^2) \frac{du}{dx} + n(n+1)(1 - x^2)u = 0 \quad (4.35)$$

を式 (4.25) と比較すると、

$$p_0 = (1 - x^2)^2, \quad p_1 = -2x(1 - x^2), \quad p_2 = n(n+1)(1 - x^2)$$

となる。これが式 (4.26), (4.27) の形に因子分解できるとして、 $f(n, x) = \tilde{f}(n, x) = 1 - x^2$  とおくと、 $g(n, x)$  は式 (4.33) を満足しなければいけないので、 $g(n, x)$  を解く微分方程式として、

$$(1 - x^2)g' - g^2 = n(n+1)(1 - x^2) - c$$

を得る。右辺は  $x$  についての 2 次の多項式なので  $g$  は 1 次の多項式と推定できるので  $g = ax + b$  と仮定して微分方程式を解くと、

$$\begin{cases} b_1 = 0, & a_1 = n, & c_1 = n^2 \\ b_2 = 0, & a_2 = -(n+1), & c_2 = (n+1)^2 \end{cases}$$

従って、

$$g_1 = nx, \quad g_2 = -(n+1)x$$

の 2 解が得られる。ここで  $c_2(n) = c_1(n+1)$  となっていることから、 $g_1, g_2$  はそれぞれ式 (4.26), (4.27) の

$$g_1 = g(n, x), \quad g_2 = \tilde{g}(n+1, x)$$

に対応していることが分かる。これから式 (4.35) は、

$$\left[ (1 - x^2) \frac{d}{dx} - nx \right] \left[ (1 - x^2) \frac{d}{dx} + nx \right] u + n^2 u \quad (4.36)$$

$$= \left[ (1 - x^2) \frac{d}{dx} + (n+1)x \right] \left[ (1 - x^2) \frac{d}{dx} - (n+1)x \right] u + (n+1)^2 u \quad (4.37)$$

と因子分解できる。このことから、ルジャンドル多項式に対して、

$$\left[ (1 - x^2) \frac{d}{dx} + nx \right] P_n(x) = \lambda_n P_{n-1}(x) \quad (4.38)$$

$$\left[ (1 - x^2) \frac{d}{dx} - (n+1)x \right] P_n(x) = \tilde{\lambda}_n P_{n+1}(x) \quad (4.39)$$

という昇降演算子が存在することが分かる。次に、 $\lambda_n, \tilde{\lambda}_n$  を決める。ルジャンドル多項式を次数の高い方から数項を書き下すと、

$$\begin{cases} P_n(x) = \frac{1}{2^n} \frac{(2n)!}{n!n!} x^n - \frac{1}{2^{n-1}} \frac{(2n-2)!}{(n-1)!(n-2)!} x^{n-2} + \dots \\ P_{n-1}(x) = \frac{1}{2^{n-1}} \frac{(2n-2)!}{(n-1)!(n-1)!} x^{n-1} + \dots \\ P_{n+1}(x) = \frac{1}{2^{n+1}} \frac{(2n+2)!}{(n+1)!(n+1)!} x^{n+1} + \dots \end{cases} \quad (4.40)$$

これを、式 (4.38) に代入して  $x$  の  $n-1$  次の項を比較すると  $\lambda_n = n$  が、また式 (4.39) に代入して  $x$  の  $n+1$  次の項を比較すると  $\tilde{\lambda}_n = -(n+1)$  が求まる。以上のことから、ルジャンドル多項式に対する昇降演算子、

$$\left[ (1-x^2) \frac{d}{dx} + nx \right] P_n(x) = nP_{n-1}(x) \quad (4.41)$$

$$\left[ (1-x^2) \frac{d}{dx} - (n+1)x \right] P_n(x) = -(n+1)P_{n+1}(x) \quad (4.42)$$

が存在することが分かる.

また, 昇降演算式 (4.41), (4.42) から微分の項を消去すると 3 項間漸化式 (3.45) が得られる.

#### 4.5.4 チェビシエフ多項式の昇降演算子

チェビシエフ多項式  $\{T_n(x)\}$  の満たす微分方程式 (4.17) の両辺に  $1-x^2$  をかけると微分方程式,

$$(1-x^2)^2 \frac{d^2 u}{dx^2} - x(1-x^2) \frac{du}{dx} + n^2(1-x^2)u = 0$$

となる. これは,

$$\left[ (1-x^2) \frac{d}{dx} - (n-1)x \right] \left[ (1-x^2) \frac{d}{dx} + nx \right] u + n(n-1)u \quad (4.43)$$

$$= \left[ (1-x^2) \frac{d}{dx} + (n+1)x \right] \left[ (1-x^2) \frac{d}{dx} - nx \right] u + n(n+1)u \quad (4.44)$$

と因子分解できる. またチェビシエフ多項式には昇降演算子,

$$\left[ (1-x^2) \frac{d}{dx} - nx \right] T_n(x) = -nT_{n+1}(x) \quad (4.45)$$

$$\left[ (1-x^2) \frac{d}{dx} + nx \right] T_n(x) = nT_{n-1}(x) \quad (4.46)$$

が存在する. 昇降演算式 (4.45), (4.46) から微分の項を消去すると 3 項間漸化式 (3.56) が導かれる.

#### 4.5.5 ソニン多項式の昇降演算子

ソニン多項式  $\{S_n^\alpha(x)\}$  の満たす微分方程式 (4.19) の両辺に  $x$  をかけると微分方程式,

$$x^2 \frac{d^2 u}{dx^2} + (\alpha+1-x) \frac{du}{dx} + nxu = 0$$

となる. これは,

$$\left[ x \frac{d}{dx} - x + n + \alpha \right] \left[ x \frac{d}{dx} - n \right] u - n(n+\alpha)u \quad (4.47)$$

$$= \left[ x \frac{d}{dx} - n - 1 \right] \left[ x \frac{d}{dx} - x + n + 1 + \alpha \right] u - (n+1)(n+1+\alpha)u \quad (4.48)$$

と因子分解できる. またソニン多項式には昇降演算子,

$$\left[ x \frac{d}{dx} - n \right] S_n^\alpha(x) = -(n + \alpha) S_{n-1}^\alpha(x) \quad (4.49)$$

$$\left[ x \frac{d}{dx} - x + n + \alpha + 1 \right] S_n^\alpha(x) = (n + 1) S_{n+1}^\alpha(x) \quad (4.50)$$

が存在する。昇降演算式 (4.49), (4.50) から微分の項を消去すると 3 項間漸化式 (3.65) が導かれる。

#### 4.5.6 エルミート多項式の昇降演算子

エルミート多項式  $\{H_n(x)\}$  の満たす微分方程式 (4.23) は,

$$\left[ \left( \frac{d}{dx} - 2x \right) \frac{d}{dx} + 2n \right] u = \left[ \frac{d}{dx} \left( \frac{d}{dx} - 2x \right) + 2(n + 1) \right] u = 0 \quad (4.51)$$

と因子分解できる。またエルミート多項式には昇降演算子,

$$\frac{d}{dx} H_n(x) = 2n H_{n-1}(x) \quad (4.52)$$

$$\left( \frac{d}{dx} - 2x \right) H_n(x) = -H_{n+1}(x) \quad (4.53)$$

が存在する。昇降演算式 (4.52), (4.53) から微分の項を消去すると 3 項間漸化式 (3.84) が導かれる。

### 4.6 その他の重要な特殊関数

#### 4.6.1 ルジャンドルの陪関数

ルジャンドル多項式を用いて,

$$P_n^m(x) = (-)^m (1 - x^2)^{m/2} \frac{d^m P_n(x)}{dx^m} \quad (4.54)$$

で定義される関数をルジャンドルの陪関数と呼ぶ。ルジャンドル多項式に対するロドリゲ公式 (3.42) を用いて直接書き下すと,

$$P_n^m(x) = \frac{(-)^{n+m}}{2^n n!} (1 - x^2)^{m/2} \frac{d^{n+m}}{dx^{n+m}} (1 - x^2)^n \quad (4.55)$$

となる。定義から  $m$  は  $0 \leq m \leq n$  であるが,

$$P_n^{-m}(x) = (-)^m \frac{(n - m)!}{(n + m)!} P_n^m(x) \quad (4.56)$$

により,  $-n \leq m \leq n$  に拡張される。ルジャンドル陪関数は以下の性質を持つ。

#### 直交関係

$$\int_{-1}^1 P_n^m(x) P_l^m(x) dx = \frac{(n + m)!}{(n - m)!} \frac{2}{2n + 1} \delta_{nl} \quad (4.57)$$

## 漸化式

$$(n - m + 1)P_{n+1}^m(x) - (2n + 1)xP_n^m(x) + (n + m)P_{n-1}^m(x) = 0 \quad (4.58)$$

## 母関数

$$(\cos \theta + i \sin \theta \cos \phi)^n = P_n(\cos \theta) + 2 \sum_{m=1}^n \frac{n!}{(n+m)!} \cos \phi P_n^m(\cos \theta) \quad (4.59)$$

ルジャンドルの陪関数はルジャンドルの微分方程式 (4.15) と良く似た微分方程式,

$$(1 - x^2) \frac{d^2 u}{dx^2} - 2x \frac{du}{dx} + \left\{ n(n+1) - \frac{m^2}{1-x^2} \right\} u = 0 \quad (4.60)$$

を満たす. この微分方程式で  $x = \cos \theta$  と変数変換すると,  $\frac{d}{dx} = -\frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta}$  などの関係から,

$$\left[ \frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left( \sin \theta \frac{d}{d\theta} \right) - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} + n(n+1) \right] u = 0 \quad (4.61)$$

と書き換えられる.  $P_n^m(\cos \theta)$  は当然この微分方程式の解である.

### 4.6.2 球面調和関数

ルジャンドルの陪関数を用いて

$$Y_l^m(\theta, \phi) = (-)^{\frac{m+|m|}{2}} \left[ \frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!} \right]^{1/2} P_l^{|m|}(\cos \theta) e^{im\phi} \quad (4.62)$$

と定義される関数を球面調和関数と呼ぶ. 球面調和関数はその定義から明らかに微分方程式,

$$\left[ \frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left( \sin \theta \frac{d}{d\theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{d^2}{d\phi^2} + n(n+1) \right] u = 0 \quad (4.63)$$

を満たす. この方程式で最初の 2 項の微分演算子は, ラプラシアン ( $\Delta = \frac{d^2}{dx^2} + \frac{d^2}{dy^2} + \frac{d^2}{dz^2}$ ) を極座標で書き直した時の角度部分の演算子に対応する. 従って, 球面調和関数はラプラス方程式 ( $\Delta u = 0$ ) またはヘルムホルツの方程式 ( $\Delta u = k^2 u$ ) を極座標で変数分離して得られる微分方程式の角度部分の固有関数になっている. そのために物理の様々な面で重要な役割を果たす.

球面調和関数は直交関係,

$$\int_0^{2\pi} \int_0^\pi Y_l^{m*}(\theta, \phi) Y_{l'}^{m'}(\theta, \phi) d\theta d\phi = \delta_{ll'} \delta_{mm'} \quad (4.64)$$

を満たす.

### 角運動量演算子

角運動量演算子  $l$  を  $l = -i\mathbf{r} \times \nabla$  により定義する (量子力学ではさらに  $\hbar$  をかけて  $l = -i\hbar\mathbf{r} \times \nabla$  と定義するので注意すること). これはベクトル型の演算子である. 具体形を書き下すと,

$$l_x = -i \left( y \frac{d}{dz} - z \frac{d}{dy} \right) \quad (4.65)$$

$$l_y = -i \left( z \frac{d}{dx} - x \frac{d}{dz} \right) \quad (4.66)$$

$$l_z = -i \left( x \frac{d}{dy} - y \frac{d}{dx} \right) \quad (4.67)$$

すると,  $l^2 = -\left[\frac{1}{\sin\theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin\theta \frac{d}{d\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{d^2}{d\phi^2}\right]$  と  $l_x = -i \frac{\partial}{\partial\phi}$  より,

$$l^2 Y_l^m(\theta, \phi) = l(l+1) Y_l^m(\theta, \phi) \quad (4.68)$$

$$l_z Y_l^m(\theta, \phi) = m Y_l^m(\theta, \phi) \quad (4.69)$$

が成り立つ。また,

$$l_{\pm} = l_x \pm i l_y = e^{\pm i\phi} \left( \pm \frac{\partial}{\partial\theta} + i \cot\theta \frac{\partial}{\partial\phi} \right) \quad (4.70)$$

と  $l_{\pm}$  を定義すると, これは  $m$  についての昇降演算子になっている,

$$l_{\pm} Y_l^m(\theta, \phi) = \sqrt{l(l+1) - m(m \pm 1)} Y_l^{m \pm 1}(\theta, \phi) \quad (4.71)$$

が成り立つ。

### 球面調和関数の具体形

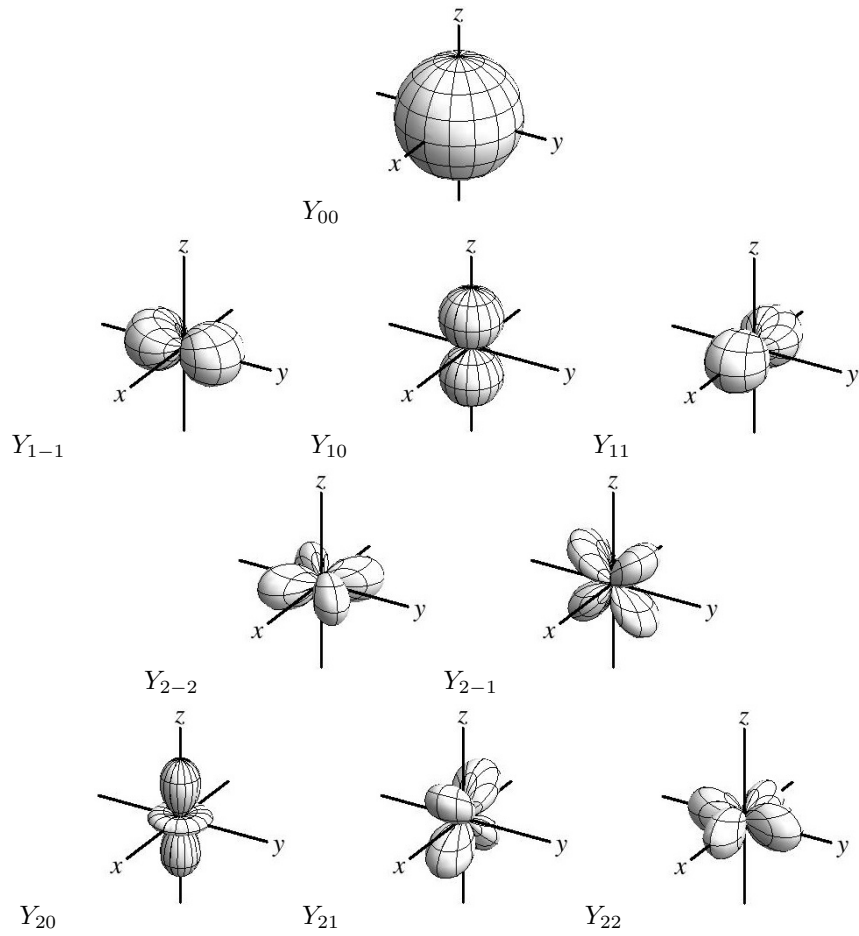
球面調和関数の具体形を示しておく。

$$\begin{aligned} Y_0^0 &= \frac{1}{\sqrt{4\pi}}, \\ Y_1^0 &= \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos\theta, & Y_1^{\pm 1} &= \mp \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \sin\theta e^{\pm i\phi}, \\ Y_2^0 &= \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3 \cos^2\theta - 1), & Y_2^{\pm 1} &= \mp \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin\theta \cos\theta e^{\pm i\phi}, & Y_2^{\pm 2} &= \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2\theta e^{\pm 2i\phi} \end{aligned}$$

量子力学では, これらの球面調和関数を線形結合により立方対称場の基底になるようにした立方球面調和関数  $Y_{lm}$  を用いることが多い.  $l=0, 1, 2, 3, \dots$  に対応した軌道を習慣的にそれぞれ  $s, p, d, f$  軌道と呼ぶ. 以下に  $l=2$  までの立方球面調和関数の具体的な表式とその習慣的な名前をまとめておく.  $l=2$  までの立方球面調和関数は,  $Y_{lm} = \frac{1}{\sqrt{2}} \{(-)^m Y_l^m + Y_l^{-m}\}$ ,  $Y_{l-m} = -\frac{i}{\sqrt{2}} \{(-)^m Y_l^m - Y_l^{-m}\}$  で与えられる.  $l \geq 3$  では表式はもっと複雑になる.

立方球面調和関数	三角関数での表示	カルテシアンでの表示	記号
$Y_{00}$	$\frac{1}{\sqrt{4\pi}}$	$\frac{1}{\sqrt{4\pi}}$	$s$
$Y_{1-1}$	$\sqrt{\frac{3}{4\pi}} \sin\theta \sin\phi$	$\sqrt{\frac{3}{4\pi}} y$	$p_y$
$Y_{10}$	$\sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos\theta$	$\sqrt{\frac{3}{4\pi}} z$	$p_z$
$Y_{11}$	$\sqrt{\frac{3}{4\pi}} \sin\theta \cos\phi$	$\sqrt{\frac{3}{4\pi}} x$	$p_x$
$Y_{2-2}$	$\sqrt{\frac{15}{16\pi}} \sin^2\theta \sin 2\phi$	$\sqrt{\frac{15}{4\pi}} xy$	$d_{xy}$
$Y_{2-1}$	$\sqrt{\frac{15}{4\pi}} \sin\theta \cos\theta \sin\phi$	$\sqrt{\frac{15}{4\pi}} yz$	$d_{yz}$
$Y_{20}$	$\sqrt{\frac{15}{16\pi}} (3 \cos^2\theta - 1)$	$\sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3z^2 - 1)$	$d_{3z^2-1}$
$Y_{21}$	$\sqrt{\frac{15}{4\pi}} \sin\theta \cos\theta \cos\phi$	$\sqrt{\frac{15}{4\pi}} zx$	$d_{zx}$
$Y_{22}$	$\sqrt{\frac{15}{16\pi}} \sin^2\theta \cos 2\phi$	$\sqrt{\frac{15}{16\pi}} (x^2 - y^2)$	$d_{x^2-y^2}$

また、立方球面調和関数の図を下に示す。





## A 必要な公式

### 三角関数

$$\cos n\pi = (-1)^n, \quad \sin n\pi = 0 \quad (n : \text{整数})$$

$$\sin \alpha \sin \beta = -\frac{1}{2}\{\cos(\alpha + \beta) - \cos(\alpha - \beta)\}$$

$$\sin \alpha \cos \beta = \frac{1}{2}\{\sin(\alpha + \beta) + \sin(\alpha - \beta)\}$$

$$\cos \alpha \cos \beta = \frac{1}{2}\{\cos(\alpha + \beta) + \cos(\alpha - \beta)\}$$

### オイラーの定理

$$e^{ix} = \cos x + i \sin x$$

### 微積分

$$(x^n)' = nx^{n-1}, \quad \int x^n dx = \frac{x^{n+1}}{n+1} + C \quad (n \neq -1)$$

$$(\log x)' = \frac{1}{x}, \quad \int \frac{1}{x} dx = \log |x| + C$$

$$(\sin ax)' = a \cos ax, \quad \int \sin ax = -\frac{\cos ax}{a} + C$$

$$(\cos ax)' = -a \sin ax, \quad \int \cos ax = \frac{\sin ax}{a} + C$$

$$(e^{ax})' = ae^{ax}, \quad \int e^{ax} = \frac{e^{ax}}{a} + C$$

### ガウス積分

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

$$\text{部分積分} \int f(x)g'(x)dx = f(x)g(x) - \int f'(x)g(x)dx$$

### ライプニッツの公式

$$D^n[f(x)g(x)] = \sum_{k=0}^n {}_n C_k D^{n-k}[f(x)]D^k[g(x)], \quad \text{但し } D = \frac{d}{dx}$$

### 2項定理

$$(a+b)^n = \sum_{k=0}^n {}_n C_k a^{n-k} b^k$$