

が得られる。ここで、行列 M は

$$M \equiv \begin{pmatrix} 1 + i\alpha & i\alpha \\ -i\alpha & 1 - i\alpha \end{pmatrix}, \quad \alpha \equiv \frac{\lambda}{2ka} \quad (\text{D.16})$$

で定義される行列である。式 (D.15) で、係数 A, B が非自明な解を持つためには、行列

$$M \begin{pmatrix} e^{i(K-k)a} & 0 \\ 0 & e^{i(K+k)a} \end{pmatrix} - 1 = \begin{pmatrix} (1 + i\alpha)e^{i(K-k)a} - 1 & i\alpha e^{i(K+k)a} \\ -i\alpha e^{i(K-k)a} & (1 - i\alpha)e^{i(K+k)a} - 1 \end{pmatrix}$$

の行列式

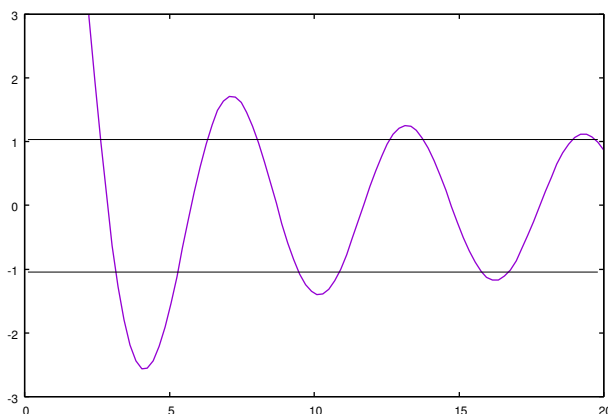
$$2e^{iKa} [\cos Ka - \cos ka - \alpha \sin ka]$$

がゼロでならねばならない。この条件から

$$\cos(Ka) = \cos(ka) + \frac{\lambda}{2ka} \sin(ka) \quad (\text{D.17})$$

が得られ、実数パラメータ K が波数 k に応じて決定されることが見て取れる。

式 (D.17) を吟味すると、波数 k の値によっては、対応する結晶波数 K が存在しない場合があることがわかる。実際、 $\lambda = 20$ のときに式 (D.17) の右辺を $z = ka$ についてプロットすると次ページに示すようなグラフが得られる。式 (D.17) の左辺が $-1 < \cos(Ka) < 1$ の範囲に制限されることより、このグラフの縦軸の値が 1 を超える領域や -1 よりも小さくなる領域では、波数 k に対応する結晶波数が存在せず、結果として、可能なエネルギー E にエネルギーギャップを生じる。これは、周期的なポテンシャルをもつ結晶中の電子状態にしばしば生じる現象である。



E 直交多項式

量子力学の具体的問題を計算するためには、ハミルトニアン演算子の固有値問題（時間に依存しないシュレディンガー方程式）を解くことが必要である。これらの固有状態はお互いに直交することから、波動関数がなんらかの直交多項式で表されることが多い。また、波動関数の言葉では、ハミルトニアン演算子が 2 階微分演算子であることから、これらの直交多項式を微分方程式の解として表現しておくことが必要である。最後に、これらの直交多項式を生成する母関数（生成関数）を知っていると、具体的な計算が著しく簡単になることが多い。

ここでは、調和振動子の計算で現れるエルミート多項式、角運動量の量子化で重要なルジャンドル多項式（およびその拡張としてのゲーゲンバウアー多項式）、水素原子の動径方程式の解を記述するラゲール多項式について、その母関数はなにか、それらの具体的な形、満たすべき微分方程式、直交性の性質をまとめておく。

E.1 エルミート多項式

まず最初に、1次元調和振動子の量子力学で現れる直交多項式であるエルミート多項式について、少し詳しくその性質を調べよう。

エルミート多項式 $H_n(x)$ はその母関数

$$S(x, s) = e^{x^2} e^{-(x-s)^2} = e^{2xs-s^2} \quad (\text{E.1})$$

を用いて

$$H_n(x) = \left. \frac{\partial^n}{\partial s^n} S(x, s) \right|_{s=0} \quad (\text{E.2})$$

として定義される n 次多項式である。たとえば、 $n = 0, 1, 2, 3, 4, 5$ の場合のエルミート多項式は

$$H_0 = 1, \quad (\text{E.3})$$

$$H_1 = 2x, \quad (\text{E.4})$$

$$H_2 = 4x^2 - 2, \quad (\text{E.5})$$

$$H_3 = 8x^3 - 12x, \quad (\text{E.6})$$

$$H_4 = 16x^4 - 48x^2 + 12, \quad (\text{E.7})$$

$$H_5 = 32x^5 - 160x^3 + 120x \quad (\text{E.8})$$

で与えられる。エルミート多項式 $H_n(x)$ を用いて母関数を表示すると

$$S(x, s) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} H_n(x) s^n \quad (\text{E.9})$$

となることに注意しておく。

次にエルミート多項式の満たすべき微分方程式（エルミートの微分方程式）を考察しよう。母関数 S を x で微分すると

$$\frac{\partial}{\partial x} S(x, s) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} H'_n(x) s^n \quad (\text{E.10})$$

となる。母関数の定義式 (E.1) より

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} S(x, s) &= 2sS(x, s) \\ &= 2s \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} H_n(x) s^n \end{aligned}$$

であるが、この式を式 (E.10) の左辺に代入し、 s の各次数で比較すると

$$H'_n = \begin{cases} 2nH_{n-1} & \text{for } n \geq 1 \\ 0 & \text{for } n = 0 \end{cases} \quad (\text{E.11})$$

が得られる。同様に、母関数 S の s 微分から

$$2(x-s) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} s^n H_n(x) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(n-1)!} s^{n-1} H_n(x)$$

が得られ、この式の両辺を s の各次数で比較することで、エルミート多項式の漸化式

$$H_{n+1} = \begin{cases} 2xH_n - 2nH_{n-1} & \text{for } n \geq 1 \\ 2xH_0 & \text{for } n = 0 \end{cases} \quad (\text{E.12})$$

が得られる。多項式 H_0 と H_1 が求まると、上記の漸化式を適用することで任意の次数 (n) のエルミート多項式 H_n を構成できることに注意しておく。

式 (E.11) を用いると、 $n \geq 1$ なる n について、

$$H_n = \frac{1}{2(n+1)} H'_{n+1}, \quad H_{n-1} = \frac{1}{4n(n+1)} H''_{n+1},$$

を示すことができる。これらの式を式 (E.12) の $n \geq 1$ の場合の右辺に代入すると

$$H''_{n+1} - 2xH_{n+1} + 2(n+1)H_{n+1} = 0$$

を得る。このようにして $n \geq 2$ の場合についてエルミートの微分方程式

$$H''_n - 2xH'_n + 2nH_n = 0 \quad (\text{E.13})$$

が得られる。一方、 H_1 と H_0 については、式 (E.3) と式 (E.4) でその具体的な形が分かっているが、これらも微分方程式 (E.13) を満たしている。つまり、すべての $n \geq 0$ について、エルミート多項式がエルミートの微分方程式 (E.13) を満たすことが分かる。

次に積分

$$I_{nn'} = \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-x^2} H_n(x) H_{n'}(x) \quad (\text{E.14})$$

を考察しよう。 $n \neq n'$ のとき、この積分がゼロになること (エルミート多項式の直交性) は、以下のようにして容易に証明できる。まず最初に、部分積分のテクニックを使って、任意の多項式 $f(x)$, $g(x)$ について、等式

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-x^2} f(x) \left[\frac{d}{dx^2} - 2x \frac{d}{dx} \right] g(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-x^2} g(x) \left[\frac{d}{dx^2} - 2x \frac{d}{dx} \right] f(x) \quad (\text{E.15})$$

を証明する。次にエルミートの微分方程式 (E.13) とさっき証明した等式 (E.15) を使って

$$\begin{aligned} 2n' I_{nn'} &= \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-x^2} H_n \left[\frac{d}{dx^2} - 2x \frac{d}{dx} \right] H_{n'} \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-x^2} H_{n'} \left[\frac{d}{dx^2} - 2x \frac{d}{dx} \right] H_n \\ &= 2n I_{nn'} \end{aligned} \quad (\text{E.16})$$

を得る。 $n \neq n'$ のときに $I_{nn'} = 0$ であることはもはや明らかであろう。

$n = n'$ のときの値まで含めて積分 $I_{nn'}$ を評価するには、母関数の積分

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-x^2} S(x, t) S(x, s) \quad (\text{E.17})$$

を計算するのが便利である。母関数 S のエルミート多項式を使った展開式 (E.9) を用いると

$$I = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{n'=0}^{\infty} \frac{s^n t^{n'}}{n! n'} I_{nn'} \quad (\text{E.18})$$

であることが示される。一方で、ガウス積分の公式を用いて積分 (E.17) を評価して

$$\begin{aligned} I &= \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-x^2 + 2xs - s^2 + 2xt - t^2} \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-(x-s-t)^2 + 2st} = \sqrt{\pi} e^{2st} \\ &= \sqrt{\pi} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(2st)^n}{n!} \end{aligned} \quad (\text{E.19})$$

を得る。式 (E.18) と式 (E.19) で s, t の各次数を比較して、

$$I_{nn'} = \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-x^2} H_n(x) H_{n'}(x) = 2^n n! \sqrt{\pi} \delta_{nn'} \quad (\text{E.20})$$

と求められた。

最後に、エルミート多項式的具体形を求めるのに便利な公式

$$H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2} \quad (\text{E.21})$$

を紹介しよう。この公式を証明するには、

$$\frac{\partial^n}{\partial s^n} S(x, s) = e^{x^2} \frac{\partial^n}{\partial s^n} e^{-(s-x)^2} = (-1)^n e^{x^2} \frac{\partial^n}{\partial x^n} e^{-(x-s)^2}$$

とエルミート多項式の定義式 (E.2) を用いればよい。

E.2 ルジャンドル多項式

球面調和関数 $Y_{\ell m}$ において $m=0$ の結果を与えるルジャンドル多項式 $P_\ell(z)$ について駆け足で紹介しよう。ここで z は、球面調和関数 $Y_{\ell m}$ において、球座標表示での $\cos \theta$ に対応する変数である。

ルジャンドル多項式 $P_\ell(z)$ の母関数は、

$$T(z, s) = \frac{1}{\sqrt{1-2sz+s^2}} \quad (\text{E.22})$$

で与えられ、この母関数を s で冪展開することによって

$$T(z, s) = \sum_{\ell=0}^{\infty} P_\ell(z) s^\ell \quad (\text{E.23})$$

としてルジャンドル多項式 P_ℓ を求めることができる。この多項式が ℓ 次の多項式になることは、この構成方法から明らか。たとえば、 $\ell = 0, 1, 2, 3, 4, 5$ の場合のルジャンドル多項式は

$$P_0(z) = 1, \quad (\text{E.24})$$

$$P_1(z) = z, \quad (\text{E.25})$$

$$P_2(z) = \frac{1}{2}(3z^2 - 1), \quad (\text{E.26})$$

$$P_3(z) = \frac{1}{2}(5z^3 - 3z), \quad (\text{E.27})$$

$$P_4(z) = \frac{1}{8}(35z^4 - 30z^2 + 3), \quad (\text{E.28})$$

$$P_5(z) = \frac{1}{8}(63z^5 - 70z^3 + 15z) \quad (\text{E.29})$$

で与えられる。とくに、 $z=1$ でのルジャンドル多項式の値が必ず

$$P_\ell(z=1) = 1 \quad (\text{E.30})$$

となることに注意しておく。

この母関数 $T(z, s)$ を用いると、ルジャンドル陪関数

$$P_\ell^m(z) = (1 - z^2)^{m/2} \frac{d^m}{dz^m} P_\ell(z) \quad (\text{E.31})$$

が

$$\sum_{\ell=m}^{\infty} P_\ell^m(z) s^\ell = (1 - z^2)^{m/2} \frac{\partial^m}{\partial z^m} T(z, s) \quad (\text{E.32})$$

と計算できることは明らかであろう。

エルミート多項式のときの式 (E.11) に対応して、ルジャンドル多項式では

$$(1 - z^2)P_\ell' = \begin{cases} -\ell z P_\ell + \ell P_{\ell-1} & \text{for } \ell \geq 1 \\ 0 & \text{for } \ell = 0 \end{cases} \quad (\text{E.33})$$

が成り立つことが示される。同様に、エルミート多項式の場合の式 (E.12) に対応して、漸化式

$$(\ell + 1)P_{\ell+1} = \begin{cases} (2\ell + 1)z P_\ell - \ell P_{\ell-1}, & \text{for } \ell \geq 1 \\ z P_0 & \text{for } \ell = 0 \end{cases} \quad (\text{E.34})$$

が得られる。

母関数 $T(z, s)$ が偏微分方程式

$$\frac{\partial}{\partial z} \left[(1 - z^2) \frac{\partial}{\partial z} T \right] + \left[s^2 \frac{\partial^2}{\partial s^2} + 2s \frac{\partial}{\partial s} \right] T = 0$$

を満たすことを示すことができる。この式を s について冪展開し、各次数の係数を比較することで、ルジャンドル多項式の満たす微分方程式

$$\frac{d}{dz} \left[(1 - z^2) \frac{dP_\ell}{dz} \right] + \ell(\ell + 1)P_\ell = 0 \quad (\text{E.35})$$

を得ることができる。微分方程式 (E.35) はルジャンドルの微分方程式と呼ばれる微分方程式である。この微分方程式は、磁気量子数がゼロ ($m = 0$) の場合に角運動量演算子 $(\vec{L}^{\text{op}})^2$ の固有値問題を与える微分方程式

$$-\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left[\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} Y \right] = \ell(\ell + 1)Y \quad (\text{E.36})$$

に対応するものとなっている。このことは、変数変換 $z = \cos \theta$ から得られる関係

$$\frac{d}{dz} = \frac{d\theta}{dz} \frac{d}{d\theta} = -\frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta}, \quad (\text{E.37})$$

を用いて、式 (E.35) に現れる微分演算子を

$$\frac{d}{dz} \left[(1 - z^2) \frac{d}{dz} f \right] = \frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left[\sin \theta \frac{d}{d\theta} f \right] \quad (\text{E.38})$$

と書き直してやれば示すことができる。

エルミート多項式のときと同様に、 ℓ の異なるルジャンドル多項式はある種の直交性を示す。部分積分を 2 回使うことで

$$\int_{-1}^{+1} dz P_\ell(z) \frac{d}{dz} \left[(1 - z^2) \frac{d}{dz} P_\ell(z) \right] = \int_{-1}^{+1} dz P_\ell(z) \frac{d}{dz} \left[(1 - z^2) \frac{d}{dz} P_\ell(z) \right]$$

であることを示すのは容易であろう。この式とルジャンドルの微分方程式 (E.35) を用いれば、直交性の式

$$\int_{-1}^{+1} dz P_\ell(z) P_{\ell'}(z) = 0, \quad \text{for } \ell \neq \ell' \quad (\text{E.39})$$

は簡単に示される。ルジャンドル多項式の母関数の式 (E.22), (E.23) と、ルジャンドル多項式の直交性 (E.39) を用いると

$$\int_{-1}^{+1} dz \frac{1}{1-2zs+s^2} = \sum_{\ell=0}^{\infty} \int_{-1}^{+1} dz |P_\ell(z)|^2 s^{2\ell}$$

が得られる。この式の左辺の積分は簡単に実行できて

$$\frac{1}{s} \ln \frac{1+s}{1-s} = \sum_{\ell=0}^{\infty} \int_{-1}^{+1} dz |P_\ell(z)|^2 s^{2\ell}$$

であることがわかり、左辺を s について冪展開することで

$$\int_{-1}^{+1} dz |P_\ell(z)|^2 = \frac{2}{2\ell+1}$$

が得られる。この結果をルジャンドル多項式の直交性 (E.39) とまとめて、規格直交関係の式として

$$\int_{-1}^{+1} dz P_\ell(z) P_{\ell'}(z) = \frac{2}{2\ell+1} \delta_{\ell\ell'} \quad (\text{E.40})$$

を得る。

最後に、ルジャンドル多項式を求めるのに便利なロドリゲスの公式

$$P_\ell(z) = \frac{1}{2^\ell \ell!} \frac{d^\ell}{dz^\ell} (z^2 - 1)^\ell \quad (\text{E.41})$$

を (証明なしで) 紹介しておく。

E.3 ゲーゲンバウアー多項式

ルジャンドル多項式の母関数 (E.22) を一般化した母関数

$$T^{(\nu)}(z, s) = \frac{1}{(1-2sz+s^2)^\nu} \quad (\text{E.42})$$

を冪展開し、

$$T^{(\nu)}(z, s) = \sum_{n=0}^{\infty} C_n^{(\nu)}(z) s^n \quad (\text{E.43})$$

によって定義される $C_n^{(\nu)}(z)$ を考えよう。たとえば、 $n = 0, 1, 2, 3$ の場合は

$$C_0^{(\nu)} = 1, \quad (\text{E.44})$$

$$C_1^{(\nu)} = 2\nu z, \quad (\text{E.45})$$

$$C_2^{(\nu)} = 2\nu(\nu+1)z^2 - \nu \quad (\text{E.46})$$

$$C_3^{(\nu)} = \frac{4}{3}\nu(\nu+1)(\nu+2)z^3 - 2\nu(\nu+1)z \quad (\text{E.47})$$

で与えられる。

この多項式 $C_n^{(\nu)}(z)$ はゲーゲンバウアー多項式、あるいは超球多項式 (ultraspherical polynomials) と呼ばれ、 $\nu = 1/2$, $n = \ell$ の場合は

$$P_\ell(z) = C_{n=\ell}^{(\nu=1/2)}(z) \quad (\text{E.48})$$

となり、ルジャンドル多項式 $P_\ell(z)$ と一致する。式 (E.32) で与えられるルジャンドル陪関数もゲーゲンバウアー多項式を用いて

$$P_\ell^m(z) = \frac{(2m)!}{2^m m!} (1-z^2)^{m/2} C_{n=\ell-m}^{(\nu=m+1/2)}(z) \quad (\text{E.49})$$

と表示することができる。

エルミート多項式やルジャンドル多項式の場合と同様のやり方で、ゲーゲンバウアー多項式の漸化式が得られ、

$$(n+1)C_{n+1}^{(\nu)} = \begin{cases} 2(n+\nu)zC_n^{(\nu)}(z) - (n-1+2\nu)C_{n-1}^{(\nu)}(z) & \text{for } n \geq 1 \\ 2\nu z C_0^{(\nu)}(z) & \text{for } n = 0 \end{cases} \quad (\text{E.50})$$

であることがわかる。ゲーゲンバウアー多項式の微分が

$$\frac{d^m}{dz^m} C_n^{(\nu)}(z) = 2^m \nu(\nu+1) \cdots (\nu+m-1) C_{n-m}^{(\nu+m)}(z) \quad (\text{E.51})$$

であることを示すことも容易であろう。

ゲーゲンバウアー多項式 $C_n^{(\nu)}(z)$ は微分方程式

$$(1-z^2)^{-\nu+1/2} \frac{d}{dz} \left[(1-z^2)^{\nu+1/2} \frac{d}{dz} C_n^{(\nu)} \right] + n(n+2\nu)C_n^{(\nu)} = 0 \quad (\text{E.52})$$

を満たす。式 (E.52) はゲーゲンバウアーの微分方程式と呼ばれる微分方程式である。

直交性と規格化は

$$\int_{-1}^{+1} dz (1-z^2)^{\nu-1/2} C_n^{(\nu)}(z) C_{n'}^{(\nu)}(z) = \frac{\pi \Gamma(n+2\nu)}{2^{2\nu-1} (n+\nu) n! [\Gamma(\nu)]^2} \delta_{nn'} \quad (\text{E.53})$$

で与えられる。ここで Γ はガンマ関数

$$\Gamma(x) = \int_0^\infty d\xi \xi^{x-1} e^{-\xi}, \quad \text{for } x > 0 \quad (\text{E.54})$$

である。 Γ は

$$\begin{aligned} \Gamma(x+1) &= \int_0^\infty d\xi \xi^x e^{-\xi} = - \int_0^\infty d\xi \xi^x \frac{d}{d\xi} e^{-\xi} \\ &= - \xi^x e^{-\xi} \Big|_{\xi=0}^\infty + x \int_0^\infty d\xi \xi^{x-1} e^{-\xi} = x\Gamma(x) \end{aligned}$$

と計算すればわかるように

$$\Gamma(x+1) = x\Gamma(x) \quad (\text{E.55})$$

との性質をもつ。さらに

$$\Gamma(1) = \int_0^\infty d\xi e^{-\xi} = 1$$

なので、その値は非負の整数 n について、階乗の記号を用いて

$$\Gamma(n+1) = n! \quad (\text{E.56})$$

と計算される。また $x = 1/2$ のときの Γ の値として、積分変数を $\xi = \sqrt{X}$ と変数変換することで

$$\Gamma(1/2) = 2 \int_0^\infty dX e^{-X^2} = \sqrt{\pi}$$

が得られるので、 x 半整数の場合の Γ の値は

$$\Gamma(1/2) = \sqrt{\pi}, \quad \Gamma(3/2) = \frac{\sqrt{\pi}}{2}, \quad \Gamma(5/2) = \frac{3\sqrt{\pi}}{4}, \quad \dots \quad (\text{E.57})$$

と求められる。これらの式を用いれば、ゲーゲンバウアー多項式の直交性・規格化の式 (E.53) が、 $\nu = 1/2$ の場合にルジャンドル多項式の直交性・規格化の式 (E.40) に帰着することを確認するのはたやすい。

ゲーゲンバウアー多項式を求めるためのロドリゲスの公式は以下のとおり。

$$C_n^{(\nu)}(z) = \frac{(-2)^n \Gamma(n+\nu)\Gamma(n+2\nu)}{n! \Gamma(\nu)\Gamma(2n+2\nu)} (1-z^2)^{-\nu+1/2} \frac{d^n}{dz^n} \left[(1-z^2)^{n+\nu-1/2} \right]. \quad (\text{E.58})$$

E.4 ラゲール多項式

水素原子の動径波動関数は、ラゲールの陪多項式を用いて表される。ラゲールの陪多項式の説明をする前に、そのもととなるラゲール多項式について解説しよう。

エルミート多項式、ルジャンドル多項式の場合と同様に、ラゲール多項式についても、母関数

$$U(\rho, s) = \frac{\exp\left(-\rho \frac{s}{1-s}\right)}{1-s} \quad (\text{E.59})$$

を用いた母関数表示

$$U(\rho, s) = \sum_{q=0}^{\infty} \frac{1}{q!} L_q(\rho) s^q \quad (\text{E.60})$$

が知られている。愚直に計算していけば、いろいろな q についてラゲール多項式を求めるのは容易である。たとえば

$$L_0 = 1, \quad (\text{E.61})$$

$$L_1 = 1 - \rho, \quad (\text{E.62})$$

$$L_2 = 2 - 4\rho + \rho^2, \quad (\text{E.63})$$

$$L_3 = 6 - 18\rho + 9\rho^2 - \rho^3, \quad (\text{E.64})$$

$$L_4 = 24 - 96\rho + 72\rho^2 - 16\rho^3 + \rho^4, \quad (\text{E.65})$$

$$L_5 = 120 - 600\rho + 600\rho^2 - 200\rho^3 + 25\rho^4 - \rho^5. \quad (\text{E.66})$$

エルミート多項式の場合の式 (E.11)、式 (E.12) に対応して、ラゲール多項式では

$$L'_q - qL'_{q-1} = -qL_{q-1} \quad \text{for } q \geq 1 \quad (\text{E.67})$$

$$L'_0 = 0 \quad \text{for } q = 0 \quad (\text{E.68})$$

および

$$L_{q+1} = \begin{cases} (2q+1-\rho)L_q - q^2L_{q-1} & \text{for } q \geq 1 \\ (1-\rho)L_0 & \text{for } q = 0 \end{cases} \quad (\text{E.69})$$

が得られ、これらの結果から、ラゲール多項式が微分方程式

$$\rho L_q'' + (1-\rho)L_q' + qL_q = 0 \quad (\text{E.70})$$

を満たすことを示すことができる。微分方程式 (E.70) はラゲールの微分方程式とよばれる。 $q \neq q'$ のときの直交性は

$$\int_0^\infty d\rho e^{-\rho} L_q(\rho) L_{q'}(\rho) = (q!)^2 \delta_{qq'} \quad (\text{E.71})$$

と表される。計算に便利なロドリゲスの公式

$$L_q(\rho) = e^\rho \frac{d^q}{d\rho^q} (e^{-\rho} \rho^q) \quad (\text{E.72})$$

もよく知られている。

次にラゲールの陪多項式

$$L_q^p(\rho) = \frac{d^p}{d\rho^p} L_q(\rho) \quad (\text{E.73})$$

に話題を移そう。ラゲール多項式は L_q は q 次多項式なので、その陪多項式 L_q^p は $(q-p)$ 次多項式であることに注意。ラゲールの微分方程式 (E.70) を p 階微分することで、ラゲールの陪多項式の従う微分方程式

$$\rho(L_q^p)'' + (1+p-\rho)(L_q^p)' + (q-p)L_q^p = 0 \quad (\text{E.74})$$

が得られる。式 (E.74) もまたラゲールの微分方程式と呼ばれる。この式で $p = 2\ell + 1$, $q = n + \ell$ ととれば、水素類似原子の動径方程式と同じ微分方程式になることに注意してほしい。

ラゲールの陪多項式の母関数も式 (E.59) を ρ で p 階微分して得られる。

$$U_p(\rho, s) = \frac{(-s)^p \exp\left(-\rho \frac{s}{1-s}\right)}{(1-s)^{p+1}}, \quad (\text{E.75})$$

$$U_p(\rho, s) = \sum_{q=p}^{\infty} \frac{1}{q!} L_q^p(\rho) s^q. \quad (\text{E.76})$$

ラゲールの陪多項式も一種の直交多項式であり、 $q \neq q'$ の場合、次の積分がゼロになることを示すことができる。

$$\int_0^\infty d\rho e^{-\rho} \rho^p L_q^p(\rho) L_{q'}^p(\rho) = \frac{(q!)^3}{(q-p)!} \delta_{qq'} \quad (\text{E.77})$$

F コヒーレント状態

F.1 調和振動子の復習

ハミルトニアン

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \hat{p}^2 + \frac{1}{2} m \omega^2 \hat{x}^2 \quad (\text{F.1})$$