Laguerre 陪多項式について (補足の補足)

テキスト p.161 で，Schrödinger 方程式の動径部分が次の (A1.6) 式

$$\frac{d^2\chi}{d\rho^2}+\left[\eta+\frac{2}{\rho}-\frac{l(l+1)}{\rho^2}\right]\chi=0$$

のように変換されて，その解が (A1.8) および (A1.9)，すなわち

$$\chi(\rho)=\rho^a e^{-\sqrt{-\eta}\rho}L(\rho)$$

$$L(\rho)=b_0+b_1\rho+b_2\rho+...$$

と書けると仮定すると，a, b_0, b_1,... が求められる，というのはテキストの通りである．

そこで，p.162 の最後の 2 つの式 ((A1.22) と (A1.23)) で，$L(\rho)$ と Laguerre の陪多項式との関係が少しだけ書かれているが，それをもう少しだけ補足しておこう．

$\chi(\rho)$ が (A1.6) 式を満足するためには，テキスト p.162 (A1.16) と (A1.21) にあるように，$a=l+1$, $\eta=-1/n^2$ (ただし，n, l は整数で，$n\geq l+1$) とならなければならない．即ち，

$$\chi(\rho)=\rho^{l+1}e^{-\rho/n}L(\rho) \tag{1}$$

これをそのまま (A1.6) 式に代入して整理すると次式を得る (各自で確認せよ！).

$$\frac{2}{n\rho}\left((n-l-1)L+(n(l+1)-\rho)\frac{dL}{d\rho}\right)+\frac{d^2L}{d\rho^2}=0 \tag{2}$$

ここで，$x=2\rho/n$, $L(\rho)=L(nx/2)\equiv G(x)$ とおき，$\dfrac{dG}{dx}=\dfrac{n}{2}\dfrac{dL}{d\rho}$ などに注意して (2) 式を書き換えると，

$$x\frac{d^2G}{dx^2}+(2l+2-x)\frac{dG}{dx}+(n-l-1)G=0 \tag{3}$$

となる．この式は,

$$x\frac{d^2G}{dx^2}+(\beta+1-x)\frac{dG}{dx}+(\alpha-\beta)G=0 \tag{4}$$

の $\alpha=n+l$, $\beta=2l+1$ の場合である．この (4) 式が，Laguerre の陪方程式とよばれる微分方程式であり，その解が $G(x)=L_\alpha^\beta(x)$，すなわち Laguerre の陪多項式となるのである．

この Laguerre の陪方程式 ((4) 式) で，$\beta=0$ とおいた式

$$x\frac{d^2G}{dx^2}+(1-x)\frac{dG}{dx}+\alpha G=0 \tag{5}$$

は Laguerre の方程式とよばれ，その解 L_α は

$$L_\alpha(x)=e^x\frac{d^\alpha}{dx^\alpha}(x^\alpha e^{-x}) \tag{6}$$

となる．$\alpha=0\sim 3$ の場合の $L_\alpha(x)$ を示すと，$L_0(x)=1$, $L_1(x)=-x+1$, $L_2(x)=x^2-4x+2$, $L_3(x)=-x^3+9x^2-18x+6$ となる．(これらを直接 (5) 式に代入して，Laguerre の方程式を満たすことを各自で確かめてみよ．)

さらに，陪多項式と多項式の関係は，(A1.22) または p.100 の (1.17) にあるように,

$$L_\alpha^\beta(x)=\frac{d^\beta}{dx^\beta}L_\alpha(x) \tag{7}$$

となる．つまり，$L_\alpha(x)=L_\alpha^0(x)$ であり，$L_\alpha^\beta(x)$ は $L_\alpha(x)$ を β 階微分したものである．上の $L_3(x)$ を使うと，$L_3^1(x)=-3x^2+18x-18$, $L_3^2(x)=-6x+18$, $L_3^3(3)=-6$ などとなる．(これも，それぞれ実際に (4) 式を満たすことを確かめること．)

また，Laguerre の陪多項式について次の直交関係が成立することが証明されている．

$$\begin{aligned}&\int_0^\infty[e^{-x/2}x^{l+1}L_{n+l}^{2l+1}(x)][e^{-x/2}x^{l+1}L_{n'+l}^{2l+1}(x)]dx\\ &= \int_0^\infty e^{-x}x^{2l+2}L_{n+l}^{2l+1}(x)L_{n'+l}^{2l+1}(x)dx\\ &= \frac{2n[(n+l)!]^3}{(n-l-1)!}\delta_{nn'}\end{aligned} \tag{8}$$

ただし，$\delta_{nn'}$ は，クロネッカーの記号で，$n=n'$ のときのみ 1 となり，それ以外は 0 となる．n の異なる $R_{n,l}$ が直交することが分かるであろう．

さらにこの (8) 式を用いてテキスト p.100 (1.13) の動径部分の波動関数 $R_{n,l}$ の規格化係数が求められる．つまり，

$$\begin{aligned}R_{n,l}(r) &= \frac{N}{r}\chi(\rho)\\ &= \frac{N}{r}\rho^{l+1}e^{-\rho/n}L_{n+l}^{2l+1}(2\rho/n)\\ &= \frac{N}{a_0}\rho^l e^{-\rho/n}L_{n+l}^{2l+1}(2\rho/n)\\ &= \frac{N}{a_0}\left(\frac{nx}{2}\right)^l e^{-x/2}L_{n+l}^{2l+1}(x)\end{aligned} \tag{9}$$

の関係に注意し，$R_{n,l}$ の規格化条件 $\int_0^\infty|R_{n,l}|^2r^2dr=1$ から，(8) 式を利用して N を求めれば，テキスト p.100 (1.13) 式が得られるはずである．テキスト p.101 の演習問題 1-5 にあるように，角度部分も含めて，一度波動関数を書き下してみること !!