

## D. ガウス積分など

■ 指数関数と  $x$  のべき 1s 波動関数を規格化する際に次の形の定積分が必要である：

$$I_n = \int_0^{\infty} x^n \exp(-ax) dx$$

ただし  $a > 0$  とする.  $x^n e^{-ax}$  を微分すると

$$\frac{d}{dx} x^n e^{-ax} = nx^{n-1} e^{-ax} - ax^n e^{-ax}$$

両辺を入れ替えて, 0 から  $\infty$  で積分すると

$$n \int_0^{\infty} x^{n-1} e^{-ax} dx - a \int_0^{\infty} x^n e^{-ax} dx = [x^n e^{-ax}]_0^{\infty} = 0$$

だから

$$I_n = \frac{n}{a} I_{n-1} = \frac{n!}{a^n} I_0$$

である.  $I_0$  は

$$I_0 = \int_0^{\infty} \exp(-ax) dx = \frac{1}{a}$$

だから, 結局

$$I_n = \frac{n!}{a^{n+1}}$$

となる.

■ ガウス積分 次の定積分がしばしば必要になる.

$$I_G = \int_0^{\infty} \exp(-ax^2) dx$$

これをガウス積分という. 被積分関数は偶関数だから積分範囲を  $-\infty$  から  $\infty$  にすると定積分は二倍になる. さらに積分変数を  $y$  にした同じ積分を掛け合わせる.

$$\begin{aligned} 4I_G^2 &= \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-ax^2) dx \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-ay^2) dy \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dy \exp[-a(x^2 + y^2)] \end{aligned}$$

これは  $\exp[-a(x^2 + y^2)]$  という関数を  $xy$  平面上の全領域で積分したことになる。二次元の極座標を使うと

$$x = r \cos \theta$$

$$y = r \sin \theta$$

また

$$dx dy = r dr d\theta$$

だから

$$\begin{aligned} 4I_G^2 &= \int_0^\infty dr \int_0^{2\pi} d\theta \exp(-ar^2) r \\ &= 2\pi \int_0^\infty dr r \exp(-ar^2) \end{aligned}$$

とできる。ここで  $z = r^2$  とすると、 $dz = 2r dr$  なので

$$4I_G^2 = \pi \int_0^\infty dz \exp(-az) = \pi I_0 = \frac{\pi}{a}$$

したがって

$$I_G = \int_0^\infty \exp(-ax^2) dx = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{a}}$$

である。

■関連する定積分 マクスウェル-ボルツマンの速度分布式から平均エネルギーなどを計算するには次の積分が必要である：

$$J_n = \int_0^\infty x^{2n} \exp(-ax^2) dx$$

ただし  $a > 0$  とする。  $x^{2n+1} \exp(-ax^2)$  を微分すると

$$\frac{d}{dx} x^{2n+1} \exp(-ax^2) = (2n+1)x^{2n} \exp(-ax^2) - 2ax^{2n+2} \exp(-ax^2)$$

両辺を入れ替えて 0 から  $\infty$  で積分すると

$$(2n+1)J_n - 2aJ_{n+1} = \left[ x^{2n+1} \exp(-ax^2) \right]_0^\infty = 0$$

より

$$J_n = \frac{2n-1}{2a} J_{n-1} = \frac{(2n-1)!!}{(2a)^n} J_0$$

ただし,  $(2n-1)!! = (2n-1) \cdot (2n-3) \cdot \dots \cdot 3 \cdot 1$  である.  $J_0$  はガウス積分だから

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

となる.

$x$  のべき指数が奇数の場合,

$$K_n = \int_0^{\infty} x^{2n-1} \exp(-ax^2) dx$$

について,  $x^2 = t$  とすると  $2x dx = dt$  であるから

$$K_n = \frac{1}{2} \int_0^{\infty} t^{n-1} \exp(-at) dt = \frac{1}{2} I_{n-1}$$

として計算できる. いうまでもないが, 偶数の場合と同様に  $x^{2n} \exp(-ax^2)$  を微分して漸化式を作っても良い.