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 ∞ で積分すると

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

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．

$$I_{\mathrm{G}} = \int_0^\infty \exp(-ax^2)dx$$

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 ∞ 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．

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

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っている．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

$$4I_{\mathrm{G}}^2 = \int_0^\infty dr \int_0^{2\pi} d\theta \exp(-ar^2) r$$

$$= 2\pi \int_0^\infty dr r \exp(-ar^2)$$

とできる．ここで $z = r^2$ とすると，$dz = 2rdr$ なので

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

したがって

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

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 ∞ 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，$(2n-1)!! = (2n-1)\bullet(2n-3)\bullet\ldots\bullet3\bullet1$ 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 $2xdx = dt$ 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．