2007年7月18日

４．水素類似原子
Hydrogen-like atom

４－４　動径波動関数
Radial wave function

水素類似原子の動径部分の波動関数は

$$R_{nl}(\rho) = \left[\left(\frac{2Z}{na_0}\right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n(n+l)!}\right]^{1/2} \rho^l \exp\left(-\frac{\rho}{2}\right) L_{n-l-1}^{2l+1}(\rho) \qquad (4.4.1)$$

$$\rho = \frac{2Z}{na_0} r$$

$$n = 1,2,3,\cdots$$

$$l = 0,1,2,\cdots,n-1$$

と書ける。ここで，

$$a_0 = \frac{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}{m_e e^2} = 5.291773(3)\times 10^{-11} \quad [\mathrm{m}] \qquad (4.4.2)$$

はボーア半径 Bohr radius， n は主量子数 principal quantum number， l は方位量子数あるいは軌道量子数 orbital quantum number である。

　関数 $L_\alpha^\beta(\rho)$ はラゲールの陪多項式 associated Laguerre polynomial であり，以下の式で定義される。

$$L_\alpha(x) = \frac{e^x}{\alpha!}\frac{d^\alpha}{dx^\alpha}\left(x^\alpha e^{-x}\right) \qquad \alpha = 0,1,2,3,\cdots$$

$$L_\alpha^\beta(\rho) \equiv \frac{e^\rho \rho^{-\beta}}{\alpha!}\frac{d^\alpha}{d\rho^\alpha}\left(e^{-\rho}\rho^{\alpha+\beta}\right) = (-1)^\beta \frac{d^\beta}{d\rho^\beta} L_{\alpha+\beta}(\rho) \qquad \beta = 0,1,2,\cdots,\alpha$$

具体的な形式は，

$$L_0^0(x) = L_0(x) = 1$$

$$L_1^0(x) = L_1(x) = -x+1$$

$$L_1^1(x) = -x+2$$

$$L_2^0(x) = L_2(x) = \frac{1}{2}\left(x^2-4x+2\right)$$

$$L_2^1(x) = \frac{1}{2}\left(x^2-6x+6\right)$$

$$L_2^2(x) = \frac{1}{2}\left(x^2-8x+12\right)$$

$$L_2^2(x) = \frac{1}{2}\left(x^2-8x+12\right)$$

$$L_3^0(x) = L_3(x) = \frac{1}{6}\left(-x^3+9x^2-18x+6\right)$$

$$L_3^1(x)=\frac{1}{6}\left(-x^3+12x^2-36x+24\right)$$
$$L_3^2(x)=\frac{1}{6}\left(-x^3+15x^2-60x+60\right)$$
$$L_3^3(x)=\frac{1}{6}\left(-x^3+18x^2-90x+120\right)$$
$$L_4^0(x)=L_4(x)=\frac{1}{24}\left(x^4-16x^3+72x^2-96x+24\right)$$
$$L_4^1(x)=\frac{1}{24}\left(x^4-20x^3+120x^2-240x+120\right)$$
$$L_4^2(x)=\frac{1}{24}\left(x^4-24x^3+180x^2-480x+360\right)$$
$$L_4^3(x)=\frac{1}{24}\left(x^4-28x^3+252x^2-840x+840\right)$$
$$L_4^4(x)=\frac{1}{24}\left(x^4-32x^3+336x^2-1344x+1680\right)$$

などである。

ラゲールの陪多項式として別の定義を使えば，水素類似原子の動径部分の波動関数は

$$R_{nl}(\rho)=-\sqrt{\frac{4(n-l-1)!}{n^4\left[(n+l)!\right]^3}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}\rho^l\exp\left(-\frac{\rho}{2}\right)La_{n+l}^{2l+1}(\rho) \qquad (4.4.3)$$

と書ける。関数 $La_\alpha^\beta(\rho)$ はラゲールの陪多項式 associated Laguerre polynomial であるが，以下の式で定義される。

$$La_\alpha(\rho)=e^\rho\frac{d^\alpha}{d\rho^\alpha}\left(\rho^\alpha e^{-\rho}\right) \qquad \alpha=0,1,2,3,\cdots$$
$$La_\alpha^\beta(\rho)\equiv\frac{d^\beta}{d\rho^\beta}L_\alpha(\rho) \qquad \beta=0,1,2,\cdots,\alpha$$

この定義だと，

$$La_0^0(x)=1$$
$$La_1^0(x)=-x+1$$
$$La_1^1(x)=-1$$
$$La_2^0(x)=x^2-4x+2$$
$$La_2^1(x)=2x-4$$
$$La_2^2(x)=2$$
$$La_3^0(x)=-x^3+9x^2-18x+6$$
$$La_3^1(x)=-3x^2+18x-18$$
$$La_3^2(x)=-6x+18$$
$$La_3^3(x)=-6$$

などとなる。

付録４－４　動径波動関数

ここでは動径部分に関する微分方程式

$$\frac{1}{R(r)}\frac{d}{dr}\left[r^2\frac{dR(r)}{dr}\right]+\frac{2m_\mathrm{e}r^2}{\hbar^2}\left(E+\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\right)=l(l+1)$$

$$\Leftrightarrow\frac{r^2}{R(r)}\frac{d^2R(r)}{dr^2}+\frac{2r}{R(r)}\frac{dR(r)}{dr}+\frac{2m_\mathrm{e}r^2}{\hbar^2}\left(E+\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\right)=l(l+1)$$

$$\Leftrightarrow\frac{d^2R(r)}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{dR(r)}{dr}+\left[\frac{2m_\mathrm{e}}{\hbar^2}E+\frac{m_\mathrm{e}Ze^2}{2\pi\varepsilon_0\hbar^2 r}-\frac{l(l+1)}{r^2}\right]R(r)=0$$

の解を求める。ボーア半径

$$a_0=\frac{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}{m_e e^2}=5.291773(3)\times10^{-11}\quad[\mathrm{m}]$$

を使うと，

$$\frac{d^2R(r)}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{dR(r)}{dr}+\left[\frac{2m_\mathrm{e}}{\hbar^2}E+\frac{2Z}{a_0 r}-\frac{l(l+1)}{r^2}\right]R(r)=0$$

となるが，さらに，

$$E=-\frac{Z^2\hbar^2}{2m_\mathrm{e}n^2a_0^2}=-\frac{8\pi^2\varepsilon_0^2Z^2m_\mathrm{e}e^4}{\hbar^2n^2}$$

$$r=\frac{na_0}{2Z}\rho$$

$$R(r)=S(\rho)$$

とすれば，

$$\frac{4Z^2}{n^2a_0^2}\frac{d^2S(\rho)}{d\rho^2}+\frac{8Z^2}{n^2a_0^2\rho}\frac{dS(\rho)}{d\rho}+\left[-\frac{2m_\mathrm{e}}{\hbar^2}\frac{Z^2\hbar^2m_\mathrm{e}}{2m_\mathrm{e}n^2a_0^2}+\frac{4Z^2}{na_0^2\rho}-\frac{4Z^2l(l+1)}{n^2a_0^2\rho^2}\right]S(\rho)=0$$

$$\Leftrightarrow\frac{d^2S(\rho)}{d\rho^2}+\frac{2}{\rho}\frac{dS(\rho)}{d\rho}+\left[-\frac{1}{4}+\frac{n}{\rho}-\frac{l(l+1)}{\rho^2}\right]S(\rho)=0$$

$$\Leftrightarrow S''(\rho)+\frac{2}{\rho}S'(\rho)+\left[-\frac{1}{4}+\frac{n}{\rho}-\frac{l(l+1)}{\rho^2}\right]S(\rho)=0$$

$\rho\to\infty$ のとき $S''(\rho)\to\frac{1}{4}S(\rho)$ から，

$$S(x)=\sum_{\nu=0}^{\infty}a_\nu x^{s+\nu}\exp\left(-\frac{x}{2}\right)$$

とすれば，

$$S'(x)=\sum_{\nu=0}^{\infty}a_\nu(s+\nu)x^{s+\nu-1}\exp\left(-\frac{x}{2}\right)-\frac{1}{2}\sum_{\nu=0}^{\infty}a_\nu x^{s+\nu}\exp\left(-\frac{x}{2}\right)$$

$$=\sum_{\nu=0}^{\infty}\left(s+\nu-\frac{x}{2}\right)a_\nu x^{s+\nu-1}\exp\left(-\frac{x}{2}\right)$$

$$S''(x)=\sum_{\nu=0}^{\infty}\left(-\frac{1}{2}\right)a_\nu x^{s+\nu-1}\exp\left(-\frac{x}{2}\right)+\sum_{\nu=0}^{\infty}\left(s+\nu-\frac{x}{2}\right)(s+\nu-1)a_\nu x^{s+\nu-2}\exp\left(-\frac{x}{2}\right)$$

$$+\sum_{\nu=0}^{\infty}\left(s+\nu-\frac{x}{2}\right)\left(-\frac{x}{2}\right)a_\nu x^{s+\nu-1}\exp\left(-\frac{x}{2}\right)$$

$$= \sum_{\nu=0}^{\infty} \left[-\frac{x}{2} + \left(s+\nu-\frac{x}{2}\right)(s+\nu-1) - \left(s+\nu-\frac{x}{2}\right)\frac{x}{2} \right] a_\nu x^{s+\nu-2} \exp\left(-\frac{x}{2}\right)$$
$$= \sum_{\nu=0}^{\infty} \left[-\frac{x}{2} + (s+\nu)(s+\nu-1) - (s+\nu-1)\frac{x}{2} - (s+\nu)\frac{x}{2} + \frac{x^2}{4} \right] a_\nu x^{s+\nu-2} \exp\left(-\frac{x}{2}\right)$$
$$= \sum_{\nu=0}^{\infty} \left[(s+\nu)(s+\nu-1) - (s+\nu)x + \frac{x^2}{4} \right] a_\nu x^{s+\nu-2} \exp\left(-\frac{x}{2}\right)$$

だから，

$$S''(\rho) + \frac{2}{\rho}S'(\rho) + \left[-\frac{1}{4} + \frac{n}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right] S(\rho) = 0$$
$$\Leftrightarrow \sum_{\nu=0}^{\infty} \left[(s+\nu)(s+\nu-1) - (s+\nu)\rho + \frac{\rho^2}{4} \right] a_\nu \rho^{s+\nu-2} + 2\sum_{\nu=0}^{\infty} \left(s+\nu-\frac{\rho}{2}\right) a_\nu \rho^{s+\nu-2}$$
$$+ \left[-\frac{\rho^2}{4} + \lambda\rho - l(l+1) \right] \sum_{\nu=0}^{\infty} a_\nu \rho^{s+\nu-2} = 0$$
$$\Leftrightarrow \sum_{\nu=0}^{\infty} \left[(s+\nu)(s+\nu-1) - (s+\nu)\rho \right] a_\nu \rho^{s+\nu-2} + 2\sum_{\nu=0}^{\infty} \left(s+\nu-\frac{\rho}{2}\right) a_\nu \rho^{s+\nu-2}$$
$$+ \left[n\rho - l(l+1) \right] \sum_{\nu=0}^{\infty} a_\nu \rho^{s+\nu-2} = 0$$
$$\Leftrightarrow \sum_{\nu=0}^{\infty} \left[(s+\nu)(s+\nu+1) - (s+\nu+1)\rho \right] a_\nu \rho^{s+\nu-2} + \left[n\rho - l(l+1) \right] \sum_{\nu=0}^{\infty} a_\nu \rho^{s+\nu-2} = 0$$
$$\Leftrightarrow \sum_{\nu=0}^{\infty} \left[(s+\nu)(s+\nu+1) - l(l+1) \right] a_\nu \rho^{s+\nu-2} - \left[s+\nu+1-n \right] \sum_{\nu=0}^{\infty} a_\nu \rho^{s+\nu-1} = 0$$

$a_0 \neq 0$ となるためには，$s = l$ でなければならない。そこで，

$$S(x) = x^l \exp\left(-\frac{x}{2}\right) L(x)$$

とすれば，

$$S'(x) = x^{l-1} \exp\left(-\frac{x}{2}\right) \left[\left(l-\frac{x}{2}\right) L(x) + xL'(x) \right]$$
$$S''(x) = x^{l-2} \exp\left(-\frac{x}{2}\right) \left\{ \left(l-1-\frac{x}{2}\right) \left[\left(l-\frac{x}{2}\right) L(x) + xL'(x) \right] \right.$$
$$\left. + x\left(-\frac{1}{2}\right) L(x) + x\left(l-\frac{x}{2}\right) L'(x) + xL'(x) + x^2 L''(x) \right\}$$
$$= x^{l-2} \exp\left(-\frac{x}{2}\right) \left\{ \left[(l-1)l - \left(l-\frac{1}{2}\right)x + \frac{x^2}{4} \right] L(x) + \left[(l-1)x - \frac{x^2}{2} \right] L'(x) \right.$$
$$\left. - \frac{x}{2} L(x) + \left[(l+1)x - \frac{x^2}{2} \right] L'(x) + x^2 L''(x) \right\}$$
$$= x^{l-2} \exp\left(-\frac{x}{2}\right) \left\{ \left[(l-1)l - lx + \frac{x^2}{4} \right] L(x) + \left(2lx - x^2\right) L'(x) + x^2 L''(x) \right\}$$

これらを

$$S''(\rho) + \frac{2}{\rho}S'(\rho) + \left[-\frac{1}{4} + \frac{n}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right] S(\rho) = 0$$

に代入すれば，

$$\left[l(l-1)-l\rho+\frac{\rho^2}{4}\right]L(\rho)+\left(2l\rho-\rho^2\right)L'(\rho)+\rho^2L''(\rho)$$
$$+2\left[\left(l-\frac{\rho}{2}\right)L(\rho)+\rho L'(\rho)\right]+\left[-\frac{\rho^2}{4}+n\rho-l(l+1)\right]L(\rho)=0$$
$$\Leftrightarrow\left[l(l-1)-l\rho+\frac{\rho^2}{4}+2\left(l-\frac{\rho}{2}\right)-\frac{\rho^2}{4}+n\rho-l(l+1)\right]L(\rho)+\left(2l\rho-\rho^2+2\rho\right)L'(\rho)+\rho^2L''(\rho)=0$$
$$\Leftrightarrow(n-l-1)\rho L(\rho)+(2l+2-\rho)\rho L'(\rho)+\rho^2L''(\rho)=0$$
$$\Leftrightarrow\rho L''(\rho)+(2l+2-\rho)L'(\rho)+(n-l-1)L(\rho)=0$$

これはラゲール Laguerre の微分方程式

$$\rho L''(\rho)+(\beta+1-\rho)L'(x)+\alpha L(\rho)=0$$

で $\alpha=n-l-1$，$\beta=2l+1$ の場合に等しい。この方程式の解は，以下の式で定義されるラゲールの陪多項式 associated Laguerre polynomial $L_\alpha^\beta(\rho)$ である。

$$L_\alpha(x)=\frac{e^x}{\alpha!}\frac{d^\alpha}{dx^\alpha}\left(x^\alpha e^{-x}\right)\qquad\alpha=0,1,2,3,\cdots$$
$$L_\alpha^\beta(\rho)\equiv\frac{e^\rho\rho^{-\beta}}{\alpha!}\frac{d^\alpha}{d\rho^\alpha}\left(e^{-\rho}\rho^{\alpha+\beta}\right)=(-1)^\beta\frac{d^\beta}{d\rho^\beta}L_{\alpha+\beta}(\rho)\qquad\beta=0,1,2,\cdots,\alpha$$

ラゲール多項式は，漸化式

$$(n+1)L_{n+1}(x)=(2n+1-x)L_n(x)-nL_{n-1}(x)$$

を満たす。

$$L_0(x)=1,$$
$$L_1(x)=-x+1$$
$$L_2(x)=\frac{1}{2}\left[(3-x)L_1(x)-L_0(x)\right]=\frac{1}{2}\left[(3-x)(-x+1)-1\right]$$
$$=\frac{1}{2}\left(x^2-4x+2\right)$$
$$L_3(x)=\frac{1}{3}\left[(5-x)L_2(x)-2L_1(x)\right]=\frac{1}{3}\left[(5-x)\frac{1}{2}\left(x^2-4x+2\right)-2(-x+1)\right]$$
$$=\frac{1}{6}\left[-(x-5)\left(x^2-4x+2\right)+4(x-1)\right]$$
$$=\frac{1}{6}\left(-x^3+9x^2-18x+6\right)$$

などである。

$$L_4(x)=\frac{1}{4}\left[(7-x)L_3(x)-3L_2(x)\right]=\frac{1}{4}\left[(7-x)\frac{1}{6}\left(-x^3+9x^2-18x+6\right)-3\cdot\frac{1}{2}\left(x^2-4x+2\right)\right]$$
$$=\frac{1}{24}\left[(x-7)\left(x^3-9x^2+18x-6\right)-9\left(x^2-4x+2\right)\right]$$
$$=\frac{1}{24}\left[\left(x^4-9x^3+18x^2-6x\right)-\left(7x^3-63x^2+126x-42\right)-\left(9x^2-36x+18\right)\right]$$
$$=\frac{1}{24}\left(x^4-16x^3+72x^2-96x+24\right)$$
$$L_5(x)=\frac{1}{120}\left(-x^5+25x^4-200x^3+600x^2-600x+120\right)$$

$$L_6(x)=\frac{1}{720}\left(x^6-36x^5+450x^4-2400x^3+5400x^2-43200x+720\right)$$
$$L_7(x)=\frac{1}{5040}\left(-x^7+49x^6-882x^5+7350x^4-29400x^3+52920x^2-35280x+5040\right)$$

ラゲールの陪多項式は，漸化式

$$\sum_{r=0}^{n}L_r^k(x)=L_n^{k+1}(x)$$
$$L_n^k(x)=L_n^{k+1}(x)-L_{n-1}^{k+1}(x)$$

を満たす。

$$n!L_n^{k+1}(x)=\sum_{r=0}^{n}\frac{n!}{r!}r!L_r^k(x)$$

たとえば，

$$L_1^1(x)=\sum_{\nu=0}^{1}\ L_\nu^0(x)=L_0^0(x)+L_1^0(x)=1-x+1=-x+2$$
$$L_2^1(x)=\sum_{\nu=0}^{2}\ L_\nu^0(x)=L_0^0(x)+L_1^0(x)+L_2^0(x)=1-x+1+\frac{1}{2}\left(x^2-4x+2\right)$$
$$=\frac{1}{2}\left[2(1-x+1)+\left(x^2-4x+2\right)\right]$$
$$L_2^2(x)=\sum_{\nu=0}^{2}\ L_\nu^1(x)=L_0^1(x)+L_1^1(x)+L_2^1(x)$$

などである。

また，明示的に

$$L_n^k(x)=\sum_{m=0}^{n}\ (-1)^m\frac{(n+k)!}{(n-m)!(k+m)!m!}x^m$$
$$=\sum_{m=0}^{n}\ (-1)^m\binom{n+k}{n-m}\frac{x^m}{m!}$$

と表される。

$$L_0^k(x)=1$$
$$L_1^k(x)=-x+k+1$$
$$L_2^k(x)=\frac{1}{2}\left[x^2-2(k+2)x+(k+1)(k+2)\right]$$
$$L_3^k(x)=\frac{1}{6}\left[-x^3+3(k+3)x^2-2(k+2)(k+3)x+(k+1)(k+2)(k+3)\right]$$

などとなる。より具体的に

$$L_0^0(x)=1$$
$$L_1^0(x)=-x+1$$
$$L_1^1(x)=-x+2$$
$$L_2^0(x)=\frac{1}{2}\left(x^2-4x+2\right)$$
$$L_2^1(x)=\frac{1}{2}\left(x^2-6x+6\right)$$
$$L_2^2(x)=\frac{1}{2}\left(x^2-8x+12\right)$$

$$L_2^2(x)=\frac{1}{2}\left(x^2-8x+12\right)$$
$$L_3^0(x)=\frac{1}{6}\left(-x^3+9x^2-18x+6\right)$$
$$L_3^1(x)=\frac{1}{6}\left(-x^3+12x^2-36x+24\right)$$
$$L_3^2(x)=\frac{1}{6}\left(-x^3+15x^2-60x+60\right)$$
$$L_3^3(x)=\frac{1}{6}\left(-x^3+18x^2-90x+120\right)$$
$$L_4^0(x)=\frac{1}{24}\left(x^4-16x^3+72x^2-96x+24\right)$$
$$L_4^1(x)=\frac{1}{24}\left(x^4-20x^3+120x^2-240x+120\right)$$
$$L_4^2(x)=\frac{1}{24}\left(x^4-24x^3+180x^2-480x+360\right)$$
$$L_4^3(x)=\frac{1}{24}\left(x^4-28x^3+252x^2-840x+840\right)$$
$$L_4^4(x)=\frac{1}{24}\left(x^4-32x^3+336x^2-1344x+1680\right)$$
などとなる。

ラゲールの陪多項式の微分は,
$$x\frac{dL_n^k(x)}{dx}=nL_n^k(x)-(n+k)L_{n-1}^k(x)$$
で与えられる。

ラゲールの陪多項式の母関数 generating function は
$$U_p(\rho,s)=\frac{(-s)^p}{(1-s)^{p+1}}\exp\left(-\frac{ps}{1-s}\right)=\sum_{q=p}^{\infty}\frac{L_q^p(\rho)}{q!}s^q$$
で与えられる。
$$L_q^p(\rho)=\left(\frac{\partial^p U_p(\rho,s)}{\partial s^p}\right)_{s=0}$$
である。

ラゲールの陪多項式には直交関係
$$\int_0^\infty \exp(-x)x^k L_n^k(x)L_m^k(x)dx=\begin{cases}0 & [m\neq n]\\ \dfrac{(n+k)!}{n!} & [m=n]\end{cases}$$
が成り立つ。

規格化定数を N_{nl} として動径波動関数を
$$R_{nl}(\rho)=N_{nl}\rho^l L_{n-l-1}^{2l+1}(\rho)\exp\left(-\frac{\rho}{2}\right)$$
とすれば，規格化条件
$$\int_0^\infty \left|R_{nl}(\rho)\right|^2 r^2dr=1,\ \rho=\frac{2Z}{na_0}r$$

$$\Leftrightarrow \int_0^\infty |R_{nl}(\rho)|^2 \rho^2 d\rho = \left(\frac{2Z}{na_0}\right)^3$$

$$\Leftrightarrow N_{nl}{}^2 \int_0^\infty \rho^{2l+2} \left[L_{n-l-1}^{2l+1}(\rho)\right]^2 \exp(-\rho) d\rho = \left(\frac{2Z}{na_0}\right)^3$$

であるが，

$$\begin{aligned}
\int_0^\infty \rho^{2l+2} \left[L_{n-l-1}^{2l+1}(\rho)\right]^2 \exp(-\rho) d\rho &= \left[-\rho^{2l+2}\left[L_{n-l-1}^{2l+1}(\rho)\right]^2 \exp(-\rho)\right]_0^\infty \\
&\quad +(2l+2)\int_0^\infty \rho^{2l+1}\left[L_{n-l-1}^{2l+1}(\rho)\right]^2 \exp(-\rho) d\rho \\
&\quad +2\int_0^\infty \rho^{2l+2} L_{n-l-1}^{2l+1}(\rho)\left[\frac{n-l-1}{\rho} L_{n-l-1}^{2l+1}(\rho) - \frac{n+l}{\rho} L_{n-l-1}^{2l+1}(\rho)\right]\exp(-\rho) d\rho \\
&= \frac{(2l+2)(n+l)!}{(n-l-1)!} + 2(n-l-1)\int_0^\infty \rho^{2l+1} L_{n-l-1}^{2l+1}(\rho) L_{n-l-1}^{2l+1}(\rho)\exp(-\rho) d\rho \\
&\quad -2(n+l)\int_0^\infty \rho^{2l+1} L_{n-l-1}^{2l+1}(\rho) L_{n-l-2}^{2l+1}(\rho)\exp(-\rho) d\rho \\
&= \frac{2(l+1)(n+l)!}{(n-l-1)!} + \frac{2(n-l-1)(n+l)!}{(n-l-1)!} \\
&= \frac{2n(n+l)!}{(n-l-1)!}
\end{aligned}$$

だから，規格化条件は

$$N_{nl}{}^2 \frac{2n(n+l)!}{(n-l-1)!} = \left(\frac{2Z}{na_0}\right)^3$$

$$\Leftrightarrow N_{nl}{}^2 = \left(\frac{2Z}{na_0}\right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n(n+l)!}$$

$$\Leftrightarrow N_{nl} = \left[\left(\frac{2Z}{na_0}\right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n(n+l)!}\right]^{1/2}$$

－－－－－

（注意）ラゲールの多項式，ラゲールの陪多項式には別の定義がある。

方程式

$$\rho L''(\rho) + (2l+2-\rho)L'(\rho) + (n-l-1)L(\rho) = 0$$

はラゲール Laguerre の微分方程式（陪方程式）

$$\rho \frac{d^2u}{d\rho^2} + (\beta+1-\rho)\frac{du}{d\rho} + (\alpha-\beta)u = 0$$

で $\alpha = n+l$，$\beta = 2l+1$ の場合に等しい。この方程式の解は，以下の式で定義されるラゲールの陪多項式 associated Laguerre polynomial $La_\alpha^\beta(\rho)$ である。

$$La_\alpha(\rho) = e^\rho \frac{d^\alpha}{d\rho^\alpha}\left(\rho^\alpha e^{-\rho}\right) \qquad \alpha = 0,1,2,3,\cdots$$

$$La_\alpha^\beta(\rho) \equiv \frac{d^\beta}{d\rho^\beta} L_\alpha(\rho) \qquad \beta = 0,1,2,\cdots,\alpha$$

［参考文献］

佐藤博保氏のホームページ，量子化学の講義録9時間目，
http://www.ztv.ne.jp/satlaser/ganbaru/qc9.html（2007年7月16日参照）

Weisstein, Eric W. "Laguerre Polynomial." From MathWorld--A Wolfram Web Resource.
http://mathworld.wolfram.com/LaguerrePolynomial.html