

注：以下の解説は、「物理と特殊関数-入門セミナー-」の執筆において、当初採用するつもりだった「昇降演算子」を用いる調和振動子の取り扱いである。数学的には簡潔ではあるが、初心者には演算子的な扱い方自体が理解の妨げになることがあるようなので、没とした。

1 調和振動子とエルミート多項式

今日は、いよいよ量子力学的調和振動子を考える日だ。そもそも、真理子が「特殊関数がわからなくなった」のは、量子力学の本のなかで、エルミート多項式に出会ってしまったときからなのだ。

「真理子ちゃん、今日は量子力学的な調和振動子を考えるのだったね。だが、まずは古典的な調和振動子の運動の復習をしておこう。さて、フックの法則に従うバネに結び付けられた質量 m の質点つまり粒子の運動を考える。バネ定数を k とすると、その粒子（ボール）は

$$F = -kx \quad (1)$$

なる大きさの力を受けるわけだから、ニュートンの運動方程式は

$$-kx(t) = m \frac{d^2 x(t)}{dt^2} \quad (2)$$

となる。この微分方程式の解がサインあるいはコサインで表されることは、もちろんよく知っているね。それを確認しておこう。まず、 $\omega^2 = k/m$ とおくと、(2) 式は

$$\left(\frac{d^2}{dt^2} + \omega^2 \right) x(t) = 0 \quad (3)$$

と書ける。この式は、さらに

$$\left(\frac{d}{dt} - i\omega \right) \left(\frac{d}{dt} + i\omega \right) x(t) = 0 \quad (4)$$

と書き換えることができることに注目しよう。」

「因数分解ですね。でも、微分の演算が入っている式は、一般には順序が交換できないから、因数分解はしてはいけないのではないですか。… あ、この場合は ω が定数だから、いいんですね。」

「その通り。 $(d/dt - i\omega)$ という因子と $(d/dt + i\omega)$ という因子は交換できるのだ。だから、(4) 式は2つの式に分解できる。つまり、求める解は

$$\left(\frac{d}{dt} - i\omega \right) x(t) = 0 \quad (5)$$

または

$$\left(\frac{d}{dt} + i\omega \right) x(t) = 0 \quad (6)$$

のどちらかを満たすものというわけだね。(5) 式と (6) 式の解は、それぞれ $a \exp(i\omega t)$ と $b \exp(-i\omega t)$ であることはすぐにわかるだろう。これらが、(2) 式の1次独立な解となっているから、(2) 式の一般解は、

$$x(t) = a \exp(i\omega t) + b \exp(-i\omega t) \quad (7)$$

で表されることになる。で、 a と b を決めるには、初期条件、つまり運動を始めさせる時刻を $t = 0$ として、そのときのバネの位置と速度を与えてやらねばならない。要するに、バネにつながった粒子を、どの位置から、どれくらいのスピードで手から離すか、ということだ。ここでは、初期の位置を $x(0) = A$ 、速度を $v(0) = \dot{x}(0) = 0$ としよう。すると、(7) 式より、まず

$$x(0) = a + b = A \quad (8)$$

が得られる。また、速度に関しては、(7) 式を微分して

$$\dot{x}(t) = i a \omega \exp(i \omega t) - i b \omega \exp(-i \omega t) \quad (9)$$

となるから、速度に関する初期条件から

$$\dot{x}(0) = i \omega (a - b) = 0 \quad (10)$$

つまり $a = b$ を得る。これらの連立方程式を解けば、 $a = b = A/2$ となる。したがって、与えられた初期条件を満たす解として、

$$x(t) = \frac{A}{2} (\exp(i \omega t) + \exp(-i \omega t)) = A \cos(\omega t) \quad (11)$$

が求まったわけだ。

ここまでは、力学で学んだことの復習だ。また、ここまでの、古典力学の問題としては完全に解けたことになる。つまり、このバネの問題についてさらに何か考えたいときに必要な情報は、全て (11) 式に含まれているのだ。例えば、粒子の速度は、

$$v(t) = -A \omega \sin(\omega t) \quad (12)$$

となることが (11) 式から直ちにわかる。もちろんこれは、(9) 式からも求まる。また、この振動子のエネルギーは、

$$E = \frac{1}{2} m v^2 + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \quad (13)$$

に (11) 式と (9) 式を代入して、

$$E = \frac{1}{2} m [-A \omega \sin(\omega t)]^2 + \frac{1}{2} m \omega^2 [A \cos(\omega t)]^2 = \frac{1}{2} m \omega^2 A^2 \quad (14)$$

であることが分かる。おっと、バネの位置エネルギーが

$$V(x) = \frac{1}{2} k x^2 = \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \quad (15)$$

であることはいいね。」

「はい、ポテンシャルは $F = -dV/dx$ を満たしますから、 $F = -kx$ を積分すれば求まります。実際、 $V = kx^2/2$ を微分すれば、ちゃんと力にもどることが確かめられます。」

「そうそう、そういうこと。上の式は後で重要になるから、黒板から消さないでおこう。」

さて、私たちはこれから量子力学的なバネを考えようとしているのだが、量子力学で得られるバネの運動を表す解は、(11) 式のような、古典力学の解とは本質的に異なる部分があるのだよね。」

「はい、量子力学では、ニュートン方程式の代わりに、シュレーディンガー方程式

$$i \hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) = \hat{H}(\hat{p}, x) \Psi(x, t) \quad (16)$$

が、ポテンシャル $V(x)$ 中の粒子 1 次元の運動を表します。ここに

$$\hat{H}(\hat{p}, x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \quad (17)$$

はハミルトニアン演算子と呼ばれ、古典的なハミルトニアン関数

$$H(p, x) = \frac{p^2}{2m} + V(x) \quad (18)$$

に含まれる運動量 p を、量子力学的な運動量演算子

$$\hat{p} = -i \hbar \frac{\partial}{\partial x} \quad (19)$$

に置き換えることによって、量子力学のものに変身させたものです。そして、シュレーディンガー方程式を解いて求まる波動関数 $\Psi(x, t)$ というものが、量子力学的粒子の運動の情報を与えてくれる量です。波動関数の物理的な意味は、「 $|\Psi(x, t)|^2 dx$ は、粒子が時刻 t において位置 x に見出される確率に比例する」というものです。」

「ほほう、完璧な答えだね。それだけ分かっているならば真理子ちゃんは、量子力学を使いこなせるよ。」

「茶化さないでください。言葉では言えても、そのココロが分からないから、大島先生にこうして教えていただいているのではないですか。」

「おっと、失礼、失礼。だがね、実は私も量子力学を理解しているとは、到底言えないんだ。そもそもこれは私の信念なのだが、量子力学は巨視的世界に住む我々には、決して理解できないものなのではないかな。真理子ちゃんが先ほど言った波動関数の意味は、「コペンハーゲン解釈」と言って、ボーア、ハイゼンベルグらのグループによって確立され、現在の主流になったものなのだ。君はアインシュタインが量子力学を死ぬまで認めなかったという話を聞いたことがあるだろう。だが、他の量子論の開拓者たちであるプランクも、ド・ブローイも、シュレーディンガーも、実は量子力学を認めてはいなかったのだよ。」

「えっ、本当ですか。」

「そうだ。ただ、念のために言うておくと、彼らが量子力学の数学的構造を理解できなかったなどと誤解してはならない。確率解釈はあまりに決定論的な世界観から外れており、彼らにとっては物理的実在をも不確かなものに見えているように見えたのだろうね。だからたとえば、ド・ブローイは「先行波」という概念をかつぎだし、シュレーディンガーは「ユークリッド化」という…おっと、あまりに話が横にそれ過ぎた。つまり、私の言いたかったのは、量子力学は分からなくて当然なのだ、ということだ。ただ、量子力学を使い込むにつれ、経験的知識の積み重ねがいつしか量子力学に対する一種の深い認識になる、ということはあるね。喩えて言えば、長年連れ添った夫婦のようなものだ。結婚したての頃は相手が何考えてるのだからさっぱりわからなかったのに、長年同じ屋根の下で暮らすにつれ、いつしか言葉を交わさなくても相手の気持ちがわかるという心境になるのまったく似ているね。もっとも、本当に相手を理解したかということ、やはり疑問だがね。…と、君たちには、この喩えはもっと分らんだらうな。」

「いえ、なんとなく…」

「まあいい、まあいい。話を本筋に戻そう。さて、いよいよ量子力学的な調和振動子を考えよう。先ほどのシュレーディンガー方程式に (15) 式のポテンシャルを代入すると、

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \right] \Psi(x, t) \quad (20)$$

となるが、この式の左辺には t のみ、右辺には x のみを変数として入っているから、この微分方程式は変数分離できる。実際、 $\Psi(x, t) = u(x)v(t)$ とおいて代入し、さらに $u(x)v(t)$ で両辺を割れば

$$i\hbar \frac{\partial v(t)}{\partial t} / v(t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \right] u(x) / u(x) \quad (21)$$

のようになる。この式は $A(t) = B(x)$ といった格好なのだから、独立に変化する x と t に対して成立するためには $A(t) = B(x) = \text{定数}$ という形にならねばならない。そこで、この定数を ϵ とおくと、(21) 式は

$$i\hbar \frac{dv(t)}{dt} = \epsilon v(t) \quad (22)$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \right] u(x) = \epsilon u(x) \quad (23)$$

のように2つの常微分方程式に分けることができる。(22) 式はすぐに解けて、

$$v(t) = v(0) \exp\left(-\frac{i\epsilon t}{\hbar}\right) \quad (24)$$

となる。だが、時間変動を表す部分については、後で改めて考えることにしよう。

さて、問題は (23) 式をどう解くか、だ。これは残念ながら古典的調和振動子の時のようには簡単にいかない。オーソドックスな方法としては級数展開が用いられるが、ここではまず、ちょっとオシャレな解き方をまず見てみよう。」

1.1 昇降演算子を用いる解法

「とりあえず、今後の計算をすっきりさせるために、変数変換

$$X = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x \quad (25)$$

をしておこう。真理子ちゃん、 X の次元は？」

「ええと、 ω は振動数の次元だから $[T^{-1}]$ で、 \hbar は角運動量と同じ次元だから「長さ・運動量」つまり $[LMLT^{-1}]$ 。ということは、 $[MT^{-1}/ML^2T^{-1}]^{1/2} = [L^{-1}]$ 。あ、無次元ですね。」

「そうそう、お見事。つまり、 X は $\sqrt{\hbar/m\omega}$ を単位として測った長さと考えてもらってもいい。いずれにせよ、

$$\frac{1}{2}m\omega^2x^2 = \frac{\hbar\omega}{2}X^2 \quad \text{および} \quad \frac{d^2}{dx^2} = \frac{m\omega}{\hbar} \frac{d^2}{dX^2} \quad (26)$$

と書き換えられるから、(23) 式は

$$\frac{\hbar\omega}{2} \left(-\frac{d^2}{dX^2} + X^2 \right) u(X) = \epsilon u(X) \quad (27)$$

と、幾分すっきりとした形になる。さて、左辺の $-d^2/dX^2 + X^2$ に注目しよう。さあ、これは古典的調和振動子のときのような因数分解ができるだろうか。」

「いいえ、この場合は微分される変数 X が項に含まれているので、

$$\left(-\frac{d}{dX} + X \right) \left(\frac{d}{dX} + X \right) \neq \left(\frac{d}{dX} + X \right) \left(-\frac{d}{dX} + X \right) \quad (28)$$

となってしまうから、交換関係の成り立つ通常の数式のような意味では因数分解できません。」

「そうそう、その通り。しかし、そこであきらめず、もう少しこの形式を追求してみよう。とりあえず、2つの「因数」を

$$\sqrt{2}B^\dagger = \left(-\frac{d}{dX} + X \right) \quad (29)$$

$$\sqrt{2}B = \left(\frac{d}{dX} + X \right) \quad (30)$$

とにおいて、具体的に (28) 式の右辺と左辺がどうなるかを計算してみよう。まず、左辺にあたるものは

$$2B^\dagger B = \left(-\frac{d}{dX} + X \right) \left(\frac{d}{dX} + X \right) = -\frac{d^2}{dX^2} - \frac{d}{dX}X + X\frac{d}{dX} + X^2 \quad (31)$$

となる。ハミルトニアンに無い、 $-(d/dX)X + X(d/dX)$ という余計な因子が入ってきていることがわかるね。ここで、うっかり $-(d/dX)X = -1$ などとやられては困る。元々の (23) 式には $u(X)$ がかかっていたことを思い出して欲しい。 B^\dagger や B およびその組み合わせのような演算子の代数計算は、慣れないうちは常に後ろに任意の関数、例えばこの場合 $f(X)$ なんぞを置いて、

$$\left(-\frac{d}{dX}X + X\frac{d}{dX} \right) f(X) = -\frac{xf(X)}{dX} + X\frac{df(X)}{dX} = -X\frac{df(X)}{dX} - f(X) + X\frac{df(X)}{dX} = -f(X) \quad (32)$$

と計算しておいてから、 $f(X)$ を外した演算子としての関係

$$-\frac{d}{dX}X + X\frac{d}{dX} = -1 \quad (33)$$

を結論すべきだろう。まあ、ともかく (30) 式と (33) 式から、

$$2B^\dagger B = \left(-\frac{d^2}{dX^2} + X^2\right) - 1 \quad (34)$$

となる。まったく同じように逆の順序の積 BB^\dagger を計算すると、

$$2BB^\dagger = \left(-\frac{d^2}{dX^2} + X^2\right) + 1 \quad (35)$$

を得る。これら 2 式から、

$$BB^\dagger - B^\dagger B = 1 \quad (36)$$

という、いわゆる交換関係を得る。

一方、(27) 式を見れば分かるように、 X で表したハミルトニアンは

$$\hat{H} = \frac{\hbar\omega}{2} \left(-\frac{d^2}{dX^2} + X^2\right) \quad (37)$$

だから、これは B, B^\dagger を用いて表すことができる。例えば (34) 式から

$$\hat{H} = \hbar\omega \left(B^\dagger B + \frac{1}{2}\right) \quad (38)$$

となる。

さてさて、ここまでは単なる書き直しで何の面白味もないのだが、実は (27) 式を満たす波動関数 $u(X)$ と B, B^\dagger の間には面白くて役に立つ関係があるのだ。それは、

$u(X)$ が (27) 式を満たすならば、 $B^\dagger u(X)$ と $Bu(X)$ もまた (27) 式を満たす

というものだ。このことを利用すれば、次から次へと、(27) 式の固有値と固有関数を求めることができるのだ。

まず、 $Bu(X)$ について考えよう。 $Bu(X) = u_{-1}(X)$ とおき、これにハミルトニアンを演算すると

$$\hat{H}u_{-1}(X) = \hbar\omega \left(B^\dagger B + \frac{1}{2}\right) Bu(X) = \hbar\omega \left(B^\dagger BBu(X) + \frac{1}{2}Bu(X)\right) \quad (39)$$

ここで、右辺第 1 項は、もともとのシュレーディンガー方程式が

$$\hbar\omega \left(B^\dagger B + \frac{1}{2}\right) u(X) = \epsilon u(X) \quad (40)$$

つまり

$$\hbar\omega B^\dagger Bu(X) = \left(\epsilon - \frac{1}{2}\hbar\omega\right) u(X) \quad (41)$$

であったことを思い出して、さらに (36) 式を利用すると

$$\hat{H}u_{-1}(X) = (\epsilon - \hbar\omega)u_{-1}(X) \quad (42)$$

となることが導けるのだが、さあ磯田君、どうやる？」

「はっ、はい！」

突然自分の方に矛先を向けられ、居眠りしかけていた磯田は、あわてたため足をもつれさせながら黒板に向かったのだが、ちょっと目をこすった後、すらすらと計算し始めた。

「まず、(36) 式より $B^\dagger B = BB^\dagger - 1$ ですから

$$(B^\dagger B)B = (BB^\dagger - 1)B = B(B^\dagger B) - B \quad (43)$$

したがって、(41) 式を用いて

$$\begin{aligned} \hat{H}u_{-1}(X) &= \hbar\omega \left((B^\dagger B)B + \frac{1}{2}B \right) u(X) \\ &= \hbar\omega \left(B(B^\dagger B) - B + \frac{1}{2}B \right) u(X) \\ &= B \left[\hbar\omega \left(B^\dagger B + \frac{1}{2} \right) - \hbar\omega \right] u(X) \\ &= B(\epsilon - \hbar\omega)u(X) \\ &= (\epsilon - \hbar\omega)u_{-1}(X) \end{aligned} \quad (44)$$

となり、(42) 式が導けます。」

いつもぼうっとしているように見える磯田がなめらかに計算していくのを見て、真理子はちよっぴり磯田を見直した。もちろん、昨夜、真理子の前で恥をかきたくない一心で磯田が徹夜で調和振動子の復習をしていたことなど、彼女の知る由もないことであった。

「オーケー。それでは、 $B^2u(X)$ や、一般的な $B^n u(X)$ 場合はどうなる？」

「は、はい。まず、(40) 式における $u(X)$ と ϵ は特別なものではなく、単に \hat{H} の固有関数と固有値としておいたものですから、 $u(X)$ の代わりに $u_{-1}(X)$ をとると

$$\hat{H}u_{-1}(X) = (\epsilon - \hbar\omega)u_{-1}(X) \quad (45)$$

に対して、先ほどの (42) 式を導いた計算がそのまま、また使えます。つまり、

$$\hat{H}Bu_{-1}(X) = (\epsilon - \hbar\omega - \hbar\omega)Bu_{-1}(X) \quad (46)$$

です。これを繰り返せば、 $B^n u(X)$ を $u_{-n}(X)$ とおいて

$$\hat{H}u_{-n}(X) = (\epsilon - n\hbar\omega)u_{-n}(X) \quad (47)$$

を得ます。でも、これではエネルギー固有値 $\epsilon_{-n} = \epsilon - n\hbar\omega$ は、ある n 以上で必ず負になる。これは、古典的調和振動子のエネルギー

$$E = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \quad (48)$$

が、2乗の和なので必ず $E > 0$ であることと、対応原理上から矛盾する。したがって n は $\epsilon_{-n} > 0$ を満たす値でなければならないはず。ということは、最低のエネルギー固有値があるということなので、その値を基準とすることにして、改めてその最低エネルギーを ϵ_0 とおき、その値をとる波動関数を $u_0(X)$ とおくことにします。つまり

$$\hat{H}u_0(X) = \epsilon_0 u_0(X) \quad (49)$$

すると、 ϵ_0 以下のエネルギー値を持つ状態は存在できないのだから

$$Bu_0(X) = 0 \quad (50)$$

でなければなりません。なぜなら、もし $Bu_0(X) \neq 0$ だと

$$\hat{H}Bu_0(X) = (\epsilon_0 - \hbar\omega)Bu_0(X) \quad (51)$$

を満たす、エネルギー固有値 $\epsilon_0 - \hbar\omega$ が負である状態 $Bu_0(X)$ が存在することになってしまい、仮定に反することになってしまいます。」

「全くその通り。」

磯田がいつになく流暢に計算していくのを見て、大島教授は満足そうにうなずいた。

「では、今度は真理子ちゃん。実は (50) 式は、基底状態 $u_0(X)$ に関する微分方程式で、これを解けば簡単に $u_0(X)$ が求まるのだが、できるかね。」

「え？… あ、もともと B は $B = (-d/dX + X)/\sqrt{2}$ という微分を含んだ演算を表すのだったっけ！ということとは、(50) 式は、 $\sqrt{2}$ をどけて

$$\frac{du_0(X)}{dX} + Xu_0(X) = 0 \quad (52)$$

という微分方程式になりますね！」

いつの間にか B と B^\dagger の最初の定義を忘れて、単なる代数記号のように感じていた真理子は、突然 (50) 式が導けたことの重大さが分かった気がした。

「これは、わたしでも解けます。(52) 式は

$$\frac{du_0(X)/dX}{u_0(X)} = -X \quad (53)$$

と書き直せるから、積分できて

$$\log u_0(X) = -\frac{X^2}{2} + \text{積分定数} \quad (54)$$

つまり

$$u_0(X) = C_0 \exp\left(-\frac{X^2}{2}\right) \quad (55)$$

となります。ただ、 C_0 は、何か条件が無いと決まりません。」

「そうだね。 C_0 は、波動関数の規格化条件から決定されるのだが、これについてはまた後で考えよう。さあ、波動関数の次は、エネルギーだ。真理子ちゃん、基底状態のエネルギーはどう求まるかな？」

「ええと…?」

真理子の首がかしげ放しなのを見て、大島は助け舟を出した。

「 B と B^\dagger で表したハミルトニアンを、 $u_0(X)$ に演算してごらん。」

「あ、分かった！(38) 式から

$$\hat{H}u_0(X) = \hbar\omega B^\dagger Bu_0(X) + \frac{1}{2}\hbar\omega u_0(X) \quad (56)$$

ですが、(50) 式より $Bu_0 = 0$ だから右辺の第 1 項は消えて

$$\hat{H}u_0(X) = \frac{1}{2}\hbar\omega u_0(X) \quad (57)$$

となります。つまり、 $\epsilon_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$ となります。」

「その通り。」

さて、以上で調和振動子の基底状態は分かった。では磯田君、 $n \geq 1$ なる状態はどうやって求めればよいかな？」すっかり眠気さめている磯田は、待ってましたとばかり、黒板に向かった。

「(42) 式とかとは反対の計算をします。つまり、(57) 式の両辺に左から B^\dagger をかけてみる。

$$B^\dagger \hat{H}u_0(X) = \epsilon_0 B^\dagger u_0(X) \quad (58)$$

ここで

$$\begin{aligned}
 B^\dagger \hat{H} &= \hbar\omega(B^\dagger B^\dagger B + \frac{1}{2}B^\dagger) \\
 &= \hbar\omega[B^\dagger(BB^\dagger - 1) + \frac{1}{2}B^\dagger] \\
 &= \hbar\omega(B^\dagger B + \frac{1}{2} - 1)B^\dagger \\
 &= (\hat{H} - \hbar\omega)B^\dagger
 \end{aligned}$$

と計算できるから、(58) 式は

$$\hat{H}B^\dagger u_0(X) = (\hbar\omega + \epsilon_0)B^\dagger u_0(X) \quad (59)$$

を得ます。そこで $C_1 B^\dagger u_0(X) = u_1(X)$ および $\epsilon_1 = \hbar\omega + \epsilon_0 = \frac{3}{2}\hbar\omega$ とおいてみると

$$\hat{H}u_1(X) = \epsilon_1 u_1(X) \quad (60)$$

の形になる。つまり、 $u_1(X)$ と ϵ_1 は、基底状態よりもエネルギーが $\hbar\omega$ だけ大きな励起状態を与えます。で、次のエネルギーを持つ状態は、(57) 式の代わりに (60) 式を用いて全く同じ計算を行うと求められます。上の計算で添字 0 を 1 に、1 を 2 に読み替えて

$$\hat{H}u_2(X) = \epsilon_2 u_2(X) \quad (61)$$

ここに、

$$u_2(X) = C_2 B^\dagger u_1(X) = C_2 C_1 (B^\dagger)^2 u_0(X) \quad (62)$$

$$\epsilon_2 = \epsilon_1 + \hbar\omega = \hbar\omega(1 + \frac{1}{2}) \quad (63)$$

です。さらに上の励起状態は、上の計算をひたすら繰り返すことにより求められます。要するに

$$\hat{H}u_n(X) = \epsilon_n u_n(X) (n = 0, 1, 2, \dots) \quad (64)$$

の解は、

$$u_n(X) = C_n B^\dagger u_{n-1}(X) = \prod_{m=1}^n C_m (B^\dagger)^n u_0(X) \quad (65)$$

$$\epsilon_n = \epsilon_{n-1} + \hbar\omega = \hbar\omega(n + \frac{1}{2}) \quad (66)$$

となるわけです。」

「たいへん結構！で、具体的に各々の u_1, u_2, u_3, \dots を求めていくには、(65) 式に B^\dagger と $u_0(X)$ の定義を代入した形

$$u_n(X) = \frac{1}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi}}} \left(X - \frac{d}{dX} \right)^n \exp\left(-\frac{x^2}{2}\right) \quad (67)$$

を用いればよい。規格化定数については、後で述べる結果を先取りしておいた。これから

$$u_1(X) = \frac{C_0 C_1}{\sqrt{2}} \left(X - \frac{d}{dX} \right) \exp\left(-\frac{x^2}{2}\right) = \frac{1}{\sqrt{2\sqrt{\pi}}} (2X) \exp\left(-\frac{x^2}{2}\right) \quad (68)$$

$$u_2(X) = \frac{C_2}{\sqrt{2}} \left(X - \frac{d}{dX} \right) u_1(X) = \frac{1}{\sqrt{2^2 2! \sqrt{\pi}}} (4X^2 - 2) \exp\left(-\frac{x^2}{2}\right) \quad (69)$$

$$u_3(X) = \frac{1}{\sqrt{2^3 3! \sqrt{\pi}}} (8X^3 - 12X) \exp\left(-\frac{x^2}{2}\right) \quad (70)$$

といった具合に、下から順に、全ての量子数 n に対する波動関数が求まっていく。

1.2 エルミート多項式 $H_n(x)$ を用いて波動関数は表される

このように $u_n(X)$ は $\exp(-x^2/2)$ と X の多項式の積で表されることが見てとれたが、この多項式の部分は、実はエルミートの多項式と呼ばれるものなのだ。

エルミート多項式は

$$H_n(x) = (-1)^n \exp(x^2) \frac{d^n}{dx^n} \exp(-x^2) \quad (71)$$

で定義される。この定義から最初のいくつかを求めてみると、

$$H_0(x) = (-1)^0 \exp(x^2) \exp(-x^2) = 1 \quad (72)$$

$$H_1(x) = (-1) \exp(x^2) \frac{d}{dx} \exp(-x^2) = 2x \quad (73)$$

$$H_2(x) = (-1)^2 \exp(x^2) \frac{d}{dx} (2x \exp(-x^2)) = 4x^2 - 2 \quad (74)$$

などとなって、確かに u_0, u_1, u_2 に現れたものと同じ多項式となっている。つまり、 $u_n(X)$ は

$$u_n(X) = \frac{1}{\sqrt{2^n n!} \sqrt{\pi}} H_n(X) \exp\left(-\frac{x^2}{2}\right) \quad (75)$$

のように、エルミート多項式を用いて表されるのだ。この式は、(67) 式から直接導くことができる。それには、演算子としての恒等式

$$x - \frac{d}{dx} = (-1) \exp\left(\frac{x^2}{2}\right) \frac{d}{dx} \exp\left(-\frac{x^2}{2}\right) \quad (76)$$

が成立することを使う。真理子ちゃん、(76) 式はしめせるかな？」

「やってみます。さっき先生に注意されたように、後ろに適当な関数 $f(x)$ をあてて、右辺を計算してみると

$$(-1) \exp\left(\frac{x^2}{2}\right) \frac{d}{dx} \left[\exp\left(-\frac{x^2}{2}\right) f(x) \right] = (-1) \exp\left(\frac{x^2}{2}\right) \left[(-x) \exp\left(-\frac{x^2}{2}\right) f(x) + \exp\left(-\frac{x^2}{2}\right) \frac{df(x)}{dx} \right] = x f(x) - \frac{df(x)}{dx} \quad (77)$$

あ、確かに (76) 式が成立します。」

「うんうん、お見事。で、(76) 式を繰り返し用いれば、

$$\left(x - \frac{d}{dx}\right)^n = (-1)^n \exp\left(\frac{x^2}{2}\right) \frac{d^n}{dx^n} \exp\left(-\frac{x^2}{2}\right) \quad (78)$$

を得ることができる。この式を用いると、 $u_n(x)$ の規格化定数を除いた部分が

$$\begin{aligned} \left(x - \frac{d}{dx}\right)^n \exp\left(-\frac{x^2}{2}\right) &= (-1)^n \exp\left(\frac{x^2}{2}\right) \frac{d^n}{dx^n} \exp\left(-\frac{x^2}{2}\right) \exp\left(-\frac{x^2}{2}\right) \\ &= \exp\left(-\frac{x^2}{2}\right) \left[(-1)^n \exp(x^2) \frac{d^n}{dx^n} \exp(-x^2) \right] \\ &= \exp\left(-\frac{x^2}{2}\right) H_n(x) \end{aligned} \quad (79)$$

と書き直せることから、(67) 式は (75) 式に等しいことが分かる。波動関数 $u_n(X)$ が $H_n(X)$ によって表されたことは、もちろん偶然ではない。このことは、実は調和振動子のシュレーディンガー方程式を立てたときから必然的にそうなるものだったのだ。つまり、微分方程式の形がエルミート多項式を導くようなものだったのだ。だが、このことを見る前に、もう少しエルミート多項式を調べてみよう。その目的はエルミート多項式の性質を詳しく調べることによって、他の特殊関数にも通じる一般的な考え方を、君たちに身につけてもらいたいからだ。

1.3 エルミートの微分方程式、直交性、そしてノルム

ここで、証明は後回しにして、エルミート多項式の持つ重要な性質をまとめておこう。エルミート多項式は

$$\frac{d^2}{dx^2}H_n(x) - 2x\frac{d}{dx}H_n(x) + 2nH_n(x) = 0 \quad (80)$$

を満たす。これを、エルミートの微分方程式という。また、 $n \neq m$ のとき、直交関係

$$\int_{-\infty}^{\infty} H_m(x)H_n(x)e^{-x^2} dx = 0 \quad (81)$$

が成り立つ。ここで、被積分関数に含まれる $\exp(-x^2)$ を、重み関数と呼ぶ。さらに、エルミート多項式のノルムを $\|H_n\|$ で表すと、

$$\|H_n\|^2 = \int_{-\infty}^{\infty} [H_n(x)]^2 e^{-x^2} dx = 2^n n! \sqrt{\pi} \quad (82)$$

で与えられる。」

「あ、(82) 式の被積分関数は、規格化定数を除いて $|u_n(x)|^2$ になっている。ということは、このノルムというものは、まだ求めていない規格化定数の値を決めてくれるのではないですか。」

「おっ、ちゃんとポイントを押さえているね。だが真理子ちゃん、調和振動子の話に戻る前に、もう少し数学的な話を続けよう。」

1.4 母関数というもの

まず、特殊関数の性質を調べるのに無くてはならない母関数というものについて喋ろう。次の関数 $G(x, t)$

$$G(x, t) = \exp(2xt - t^2) \quad (83)$$

を考える。 $G(x, t)$ を t についてべき級数展開すると

$$G(x, t) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} H_n(x) t^n \quad (84)$$

のように、 $H_n(x)$ が t^n の係数として現れる。そこで、この $G(x, t)$ を、エルミート多項式の母関数という。文字どおり、エルミート多項式を生み出す、母なる関数だ。やり方によっては、(84) 式を $H_n(x)$ の定義としてもよいが、ここでは (71) 式を定義として採用したのだから、それから (84) 式を証明しなければならない。やってみよう。 $\exp(2xt - t^2) = \exp[-(x-t)^2] \exp(x^2)$ であることに着目し、 $\exp[-(x-t)^2]$ を t の関数と見た場合の、 x の周りでのテイラー展開を考える。すると、

$$\begin{aligned} G(x, t) &= \exp(x^2) \exp[-(x-t)^2] = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left[\frac{d^n \exp(-t^2)}{dt^n} \right]_{t=x} (-t)^n \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left[(-1)^n \exp(x^2) \frac{d^n \exp(-x^2)}{dx^n} \right] t^n \end{aligned} \quad (85)$$

のように (84) 式が証明される。

1.5 いろいろ便利な母関数

母関数の存在意義は、何といてもエルミート多項式の間になり立つ様々な関係式の証明を、至極容易なものにすることにある。ここでは、後で用いる関係式

$$\frac{d}{dx}H_n(x) = 2nH_{n-1}(x) \quad (86)$$

$$(n = 1, 2, 3, \dots)$$

$$H_{n+1}(x) - 2xH_n(x) + 2nH_{n-1}(x) = 0 \quad (87)$$

$$(n = 1, 2, 3, \dots)$$

を、母関数を使って証明してみよう。まず、(87) 式からだ。これは、 $H_n(x)$ の微分を含むので、(84) 式の両辺を x に関して偏微分してみる。

$$\frac{\partial G(x, t)}{\partial x} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \frac{dH_n(x)}{dx} t^n \quad (88)$$

ここで、左辺は

$$\begin{aligned} \frac{\partial G(x, t)}{\partial x} &= \frac{\partial}{\partial x} \exp(2xt - t^2) = 2t \exp(2xt - t^2) \\ &= 2t \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} H_n(x) t^n \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{2}{n!} H_n(x) t^{n+1} \\ &= \sum_{m=1}^{\infty} \frac{2m}{m!} H_{m-1}(x) t^m \end{aligned} \quad (89)$$

のように変形される。(88) 式と (89) 式の、 t に関して同じ次数の項を比べれば、(87) 式が成り立っていることがわかる。(88) 式も似たような方法で示せる。(84) 式の両辺を、今度は t に関して偏微分してみると

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \exp(2xt - t^2) &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} H_n(x) n t^{n-1} \\ (2x - 2t) \exp(2xt - t^2) &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(n-1)!} H_n(x) t^{n-1} \end{aligned} \quad (90)$$

のようになるから、左辺に母関数の級数展開されたものを代入し、 t に関して同じ次数の項を比べると、(88) 式が導ける。

(87) 式と (88) 式を用いれば、先ほど天下りに書いた式が証明できる。まずはエルミートの微分方程式だが、これは次のようにして簡単に導ける。(88) 式の次数を 1 つ下げた式に $2n$ を掛けて

$$2nH_n(x) - 2x(2n)H_{n-1}(x) + 2n[2(n-1)]H_{n-2}(x) = 0 \quad (91)$$

となるが、この第 2 項に (87) 式、第 3 項に

$$\frac{d^2}{dx^2} H_n(x) = 2n \frac{d}{dx} H_{n-1}(x) = 2n[2(n-1)]H_{n-2}(x) \quad (92)$$

を代入すれば (80) になる。

次に、直交性を示そう。そのためには、

$$\frac{d}{dx} \left(e^{-x^2} \frac{dH_n(x)}{dx} \right) + 2ne^{-x^2} H_n(x) = 0 \quad (93)$$

を用いるとよい。これは、暗算でも分かると思うが、エルミートの微分方程式に $\exp(-x^2)$ を掛けてちょっと変形したものだ。で、これに $H_m(x)$ を掛けたものを考え、さらに同じような式で n と m を入れ替えたものをつくって辺々引き算したものを積分する。つまりこうだね

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} dx \left(H_m(x) \left[\frac{d}{dx} \left(e^{-x^2} \frac{dH_n(x)}{dx} \right) + 2ne^{-x^2} H_n(x) \right] - H_n(x) \left[\frac{d}{dx} \left(e^{-x^2} \frac{dH_m(x)}{dx} \right) + 2me^{-x^2} H_m(x) \right] \right) \\ = \int_{-\infty}^{\infty} dx \left(\left[H_m(x) \frac{d}{dx} \left(e^{-x^2} \frac{dH_n(x)}{dx} \right) \right] - \left[H_n(x) \frac{d}{dx} \left(e^{-x^2} \frac{dH_m(x)}{dx} \right) \right] \right) \\ + 2(n-m) \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-x^2} H_m(x) H_n(x) = 0 \end{aligned} \quad (94)$$

ところが、第1項目の積分は、消えてなくなる。というのも、部分積分から

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \left[H_m(x) \frac{d}{dx} \left(e^{-x^2} \frac{dH_n(x)}{dx} \right) \right] = \left[H_m(x) e^{-x^2} \frac{dH_n(x)}{dx} \right]_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{dH_m(x)}{dx} e^{-x^2} \frac{dH_n(x)}{dx} \quad (95)$$

となるが、この第1項は $\exp(-x^2)$ があるからゼロ、そして第2項は同様な積分と打ち消しあう。したがって、

$$2(n-m) \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-x^2} H_m(x) H_n(x) = 0 \quad (96)$$

を得る。これは $n \neq m$ に対して、直交関係(81)式が成り立つことを示している。

次は、ノルムが(82)式で与えられることを示そう。最初に、

$$[H_n(x)]^2 + 2(n-1)H_n(x)H_{n-1}(x) - H_{n+1}(x)H_{n-1}(x) - 2n[H_{n-1}(x)]^2 = 0 \quad (97)$$

を証明しよう。できるかな。」

「やってみます。とにかく $[H_n(x)]^2$ を作ることを心掛けながら証明したい式に近い形を作ろうとするならば、(88)式の次数を1つ下げたものに $H_n(x)$ をかけて

$$[H_n(x)]^2 - 2xH_n(x)H_{n-1}(x) - 2(n-1)H_n(x)H_{n-2}(x) = 0 \quad (98)$$

となるけど……（しばらく、真理子は試行錯誤を繰り返していた）あっ、できました。 $2xH_n(x)$ を、再び(88)式を使って消去すれば

$$[H_n(x)]^2 - (H_{n+1}(x) + 2nH_{n-1}(x))H_{n-1}(x) - 2(n-1)H_n(x)H_{n-2}(x) = 0 \quad (99)$$

となり、これは(97)式と同じです。」

「その通り。では、次に(97)式を用いて、

$$\|H_n\|^2 = 2n\|H_{n-1}\|^2 \quad (100)$$

を示してごらん。」

「これは簡単。(97)式に重み関数と先生がおっしゃっていた $\exp(-x^2)$ をかけてから積分します。

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-x^2} [H_n(x)]^2 + 2(n-1) \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-x^2} H_n(x) H_{n-1}(x) \\ - \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-x^2} H_{n+1}(x) H_{n-1}(x) - 2n \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-x^2} [H_{n-1}(x)]^2 = 0 \end{aligned}$$

ここで、直交性から第2項と第3項は消えるから、(100)式になります。」

「すると、もう一息で(82)式だね。」

「あ、ホントですね。だって(100)式を繰り返し使えば

$$\begin{aligned} \|H_n\|^2 &= 2n\|H_{n-1}\|^2 \\ &= 2n \cdot 2(n-1)\|H_{n-2}\|^2 \\ &= \dots \\ &= 2^n n! \|H_0\|^2 \\ &= 2^n n! \sqrt{\pi} \end{aligned}$$

となりますけど、 $H_0 = 1$ だから

$$\begin{aligned} \|H_0\|^2 &= \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-x^2} [H_0(x)]^2 \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-x^2} \\ &= 2^n n! \sqrt{\pi} \end{aligned}$$

で、これは(82)式と同じです。」

「完璧だね。」