一次元調和振動子の波動関数

質量 m の粒子が平衡状態を中心として，変位 x に比例した復元力を受けて振動しているとき，この系を調和振動子と呼ぶ．この場合のこの粒子の運動は，比例定数を k として運動方程式,

$$m\frac{d^2x}{dt^2} = -kx \tag{1}$$

に従う．ここで一般に復元力 F が作るポテンシャルを $U(x)$ とするとき,

$$F = -\mathrm{grad}U = -\frac{dU}{dx} \tag{2}$$

が成り立つから，今回の場合のポテンシャルは，原点において $U(0) = 0$ と定めると,

$$U(x) = \frac{1}{2}kx^2 \tag{3}$$

が成り立つことになる．

ここで一般に調和振動子の運動は質量が m の質点が半径 A，角速度 ω の等速円運動をしている状態を x 軸上に射影したものになるから,

$$\text{バネがのびきったときのポテンシャル} = \text{原点での運動エネルギー} \tag{4}$$

より,

$$\frac{1}{2}kA^2 = \frac{1}{2}mA^2\omega^2 \tag{5}$$

$$\therefore \quad k = m\omega^2 \tag{6}$$

つまり，ポテンシャルは (3)，(6) より,

$$U(x) = \frac{1}{2}m\omega^2x^2 \tag{7}$$

と表されることになる．

この粒子に対して，量子力学を適用してみよう．定常状態のシュレディンガー方程式は，$\Psi(x,\ t) = \phi(x)T(t)$ と変数分離するとき，次の形で表せる:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\phi(x)}{dx^2} + (U(x) - E)\phi(x) = 0, \tag{8}$$

$$\text{※但し，} T(t) = e^{-\frac{iEt}{\hbar}} \tag{9}$$

この式から，始めよう．

まず，(8) 式はポテンシャルが (7) で与えられているから次の形に変形できる:

$$\frac{d^2\phi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E - \frac{1}{2}m\omega^2x^2\right)\phi = 0 \tag{10}$$

(10) 式は複雑なので，変数変換することにより，より簡単な,

$$\frac{d^2\phi}{d\xi^2} + (\varepsilon - \xi^2)\phi = 0 \tag{11}$$

の形に持っていきたい[1]．そこで一般に,

$$\frac{d^2\phi}{dx^2} + (\alpha - \beta x^2)\phi = 0 \tag{12}$$

において，$\xi \equiv \gamma x$ としたとき，γ をどのようにとれば，(11) 式が得られるか確かめてみよう．

[1] ε は，エネルギーに対応する量なのでギリシャ文字で e に対応する ε を用いた．また，ξ は英語の x に対応するギリシャ文字である．

今,

$$\frac{d\xi}{dx} = \gamma \tag{13}$$

だから,

$$\frac{d\phi}{dx} = \frac{d\xi}{dx}\frac{d\phi}{d\xi} = \gamma\frac{d\phi}{d\xi}, \tag{14}$$

$$\frac{d^2\phi}{dx^2} = \frac{d\xi}{dx}\frac{d}{d\xi}\left(\frac{d\phi}{d\xi}\right) = \gamma\frac{d}{d\xi}\left(\gamma\frac{d\phi}{d\xi}\right) = \gamma^2\frac{d^2\phi}{d\xi^2} \tag{15}$$

及び, $x^2 = \xi^2/\gamma^2$ より, (12) 式は,

$$\gamma^2\frac{d^2\phi}{d\xi^2} + \left(\alpha - \frac{\beta}{\gamma^2}\xi^2\right)\phi = 0, \tag{16}$$

$$\therefore \quad \frac{d^2\phi}{d\xi^2} + \left(\frac{\alpha}{\gamma^2} - \frac{\beta}{\gamma^4}\xi^2\right)\phi = 0, \tag{17}$$

となる. この (17) 式が (12) 式と一致するためには,

$$\frac{\alpha}{\gamma^2} = \varepsilon,\ \frac{\beta}{\gamma^4} = 1, \tag{18}$$

であればよい. 従って, これと式 (10) を比較することにより,

$$\alpha = \frac{2mE}{\hbar^2},\ \beta = \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^2,\ \gamma = \sqrt[4]{\beta} = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}},\ \varepsilon = \frac{\alpha}{\gamma^2} = \frac{2E}{\omega\hbar}, \tag{19}$$

とすればよいことが分かる. そこで早速 (11) 式を解きたいが, この微分方程式はまだ形が複雑すぎて難しいかもしれない. そこで, 近似解を利用して少しずつ求めるべき一般解に近づいていこう.

まず, $\xi \to \pm\infty$ のとき, 式 (11) は,

$$\frac{d^2\phi}{d\xi^2} = \xi^2\phi - \varepsilon\psi \simeq \xi^2\phi \tag{20}$$

に近づくことが分かる. もっと言えば一般に δ を任意の定数とするとき, $\xi \to \pm\infty$ で,

$$\frac{d^2\phi}{d\xi^2} = \xi^2\phi + \delta\phi \simeq \xi^2\phi \tag{21}$$

となるから,

$$\frac{d^2\phi}{d\xi^2} = \xi^2\phi + \delta\phi \tag{22}$$

の解によって $\xi \to \pm\infty$ における (11) 式の解を近似することが出来ることになる[2].

さて, ここで我々は, 任意の適当な定数 δ に対して式 (22) をとくことを考えよう. まず, 2 回微分して元の関数が現れるものは, e^X 及び e^{-X} の線形結合だけである. 今回はそれに, ξ^2 が掛けられた形になるのであるから, $e^{\frac{1}{2}\xi^2}$ と $e^{-\frac{1}{2}\xi^2}$ の線形結合が解になりそうである. そこで実際に解の候補として, $\phi = C_1e^{\frac{1}{2}\xi^2} + C_2e^{-\frac{1}{2}\xi^2}$ を (22) 式に代入してみると,

$$\frac{d\phi}{d\xi} = \xi C_1e^{\frac{1}{2}\xi^2} - \xi C_2e^{-\frac{1}{2}\xi^2},$$

$$\frac{d^2\phi}{d\xi^2} = \xi^2C_1e^{\frac{1}{2}\xi^2} + C_1e^{\frac{1}{2}\xi^2} + \xi^2C_2e^{-\frac{1}{2}\xi^2} - C_2e^{-\frac{1}{2}\xi^2} = \xi^2\phi + C_1e^{\frac{1}{2}\xi^2} - C_2e^{-\frac{1}{2}\xi^2},$$

となってしまい, (22) 式の形にならない. これはそもそも (22) 式の微分方程式が非線形だから, 単純に線形結合したものが解にならないためである. よってこれより (22) 式の解は $\delta = 1$ とすれば, $\phi = Ce^{\frac{1}{2}\xi^2}$ となり, $\delta = -1$ とすれば $\phi = Ce^{-\frac{1}{2}\xi^2}$ が解となることになる. ところがここで, 波動関数はボルンの確率解釈より,

$$\int_{-\infty}^{\infty}\Psi^*\Psi dx = 1$$

を満たすべきなので, 当然その空間成分である $\phi(\xi)$ も無限遠で収束していなければならない. 従って + の解は波動関数として不適当である. これより, $\phi = Ce^{-\frac{1}{2}\xi^2}$ が求める近似解となる.

[2] ε 及び δ を使用したが, 単に記号的なもので意味を考えれば明らかなように $\varepsilon - \delta$ 論法とは全く関係ない.

さて我々は (22) 式において，$\delta = -1$ の場合の解を得たわけだが，これは (11) 式で $\xi \to \pm\infty$ における近似解である．そこでこの近似解を足がかりにして (11) の一般解を求めることを考えたい．(22) 式の ($\delta = -1$ の) 解は，

$$\phi(\xi) = Ce^{-\frac{1}{2}\xi^2} \tag{23}$$

であるが，(22) 式に現れる δ を別の値 (かもしれない)ε で置き換えた場合の解は，(23) 式で表される (22) 式の解を何らかの意味で一般化した式で表せる可能性が高いだろう．それですぐに気がつく一般化として，未知定数 C をある関数 $H(\xi)$ で置き換えてみることを考える．勿論，このような置き換えが無条件で成り立つとは思えないから，何らかの束縛条件が現れるものと思われる．しかしそれを込みにしても我々は確実に一般解に近づいているといえよう．そこで

$$\phi(\xi) = H(\xi)e^{-\frac{1}{2}\xi^2} \tag{24}$$

として，微分方程式 (11) に代入してみよう．すると，

$$\frac{d\phi}{d\xi} = -\xi He^{-\frac{1}{2}\xi^2} + \frac{dH}{d\xi}e^{-\frac{1}{2}\xi^2}, \tag{25}$$

$$\frac{d^2\phi}{d\xi^2} = \xi^2 H(\xi)e^{-\frac{1}{2}\xi^2} + \left(\frac{d^2H}{d\xi^2} - 2\xi\frac{dH}{d\xi} - H\right)e^{-\frac{1}{2}\xi^2} \tag{26}$$

となるので，(11) 式と一致する条件は，

$$\frac{d^2H}{d\xi^2} - 2\xi\frac{dH}{d\xi} - H = -\varepsilon H \tag{27}$$

即ち，

$$\frac{d^2H}{d\xi^2} - 2\xi\frac{dH}{d\xi} + (\varepsilon - 1)H = 0 \tag{28}$$

となる．

ここで (28) 式を束縛条件とする解 (24) は本当に”充分”に一般化されているかどうか吟味する必要があるだろう．というのも，近似解から手探りで一般化して導いた解 (24) は，もしかしたらより一般的な解の一部になってしまっている可能性があるからである．しかしこの心配は実は杞憂に終わる．というのも，任意の $G(\xi)$ に対して，$H(\xi) \equiv G(\xi)e^{\frac{1}{2}\xi^2}$ によって H を定めると，(24) 式は，単純に，

$$\phi(\xi) = H(\xi)e^{-\frac{1}{2}\xi^2} = G(\xi)e^{\frac{1}{2}\xi^2}e^{-\frac{1}{2}\xi^2} = G(\xi) \tag{29}$$

となり，$G(\xi)$ が全くの任意なら，このようにしてとった H に対して $\phi(\xi)$ は全くの任意に取れるからである．従ってこれは，束縛条件だけで決まるから，結局 (28) 式を束縛条件とすれば解 (24) は完全に一般解を得ることが出来る．

さて，以上より最終的には，(28) の微分方程式を解くことが出来れば，波動関数 (の空間成分) が完全に求まることが分かった．(28) の微分方程式は，一般に Hermite の微分方程式と呼ばれる．(らしい。。)

ここで，この微分方程式を満たす解が冪級数で表せる場合について考えよう．$H(\xi)$ の一般解が常に冪級数で表せるという保証は現段階ではないが，ここでも取り敢えず，最も簡単に解けそうな場合について考えることにする．後でこのようにして得られた級数解だけ考えれば充分なことを簡単に説明する．

そこで今，

$$H(\xi) = \sum_{j=0}^{\infty} a_j\xi^j = a_0 + \sum_{j=1}^{\infty} a_j\xi^j \tag{30}$$

と置こう．微分方程式 (28) に代入するために，2 階微分まで計算すると，

$$\frac{dH}{d\xi} = \sum_{j=1}^{\infty} ja_j\xi^{j-1} = a_1 + \sum_{j=2}^{\infty} ja_j\xi^{j-1}, \tag{31}$$

$$\frac{d^2H}{d\xi^2} = \sum_{j=2}^{\infty} j(j-1)a_j\xi^{j-2}, \tag{32}$$

となるから，冪乗の添字をそろえて，

$$\frac{d^2H}{d\xi^2} = \sum_{j=2}^{\infty} j(j-1)a_j\xi^{j-2} \qquad =\sum_{j=0}^{\infty}(j+2)(j+1)a_{j+2}\xi^j \qquad =2a_2 + \sum_{j=1}^{\infty}(j+2)(j+1)a_{j+2}\xi^j \tag{33}$$

$$-2\xi\frac{dH}{d\xi} = -2\xi\sum_{j=1}^{\infty} ja_j\xi^{j-1} \qquad =\sum_{j=1}^{\infty} -2ja_j\xi^j \qquad =0 + \sum_{j=1}^{\infty} -2ja_j\xi^j \tag{34}$$

$$(\varepsilon = 1)H = (\varepsilon - 1)\sum_{j=0}^{\infty} a_j\xi^j \qquad =\sum_{j=0}^{\infty}(\varepsilon - 1)a_j\xi^j \qquad =(\varepsilon - 1)a_0 + \sum_{j=1}^{\infty}(\varepsilon - 1)a_j\xi^j, \tag{35}$$

が成り立つ．ここで式，(33)，(34)，(35)，の和は任意の ξ で成り立っていなければならないから，ξ の同じ次数の項の係数の和は全て 0 でなくてはならない．従って，

$$(\varepsilon - 1)a_0 + 2a_2 = 0, \tag{36}$$

$$(\varepsilon - 1 - 2j)a_j + (j+2)(j+1)a_{j+2} = 0, \qquad (j \geq 1) \tag{37}$$

が得られる．(36) 式は (37) 式において $j = 0$ を代入したものだから，これより任意の j で漸化式,

$$a_{j+2} = -\frac{\varepsilon - (2j+1)}{(j+1)(j+2)}a_j \tag{38}$$

が成り立つことになる．

ここでこの漸化式からは a_0，a_1 が決まらないが，これは元の微分方程式 (28) が 2 階の微分方程式だからである．そこで $j = 2k$ の場合と $j = 2k+1$ の場合について a_j を求めてみると，$m \geq 1$ に対して，

$$a_{2m} = a_0\prod_{k=0}^{m-1}\frac{a_{2k+2}}{a_{2k}} = a_0\prod_{k=0}^{m-1} -\frac{\varepsilon - [(4k+1)]}{(2k+1)(2k+2)} = \qquad (-1)^m\frac{\prod_{k=0}^{m-1}[\varepsilon - (4k+1)]}{2m!}a_0, \tag{39}$$

$$a_{2m+1} = a_1\prod_{k=0}^{m-1}\frac{a_{2k+3}}{a_{2k+1}} = a_1\prod_{k=0}^{m-1} -\frac{[\varepsilon - (4k+3)]}{(2k+2)(2k+3)} = \qquad (-1)^m\frac{\prod_{k=0}^{m-1}[\varepsilon - (4k+3)]}{(2m+1)!}a_1, \tag{40}$$

が成り立つことになる．この a_j を係数とする冪級数 $H(\xi) = \sum a_j\xi^j$ こそが Hermite の微分方程式 (28) の冪級数解である．

しかし，残念ながらこの級数は任意の ε，a_0，a_1 に対しては収束しない級数である．実際，(38) 式において，$j \to \infty$ のとき，

$$a_{j+2} \simeq \frac{2}{j}a_j = \frac{1}{\left(\frac{j}{2}\right)}a_j \tag{41}$$

が成り立つから，充分大きい j に対して

$$a_j\xi^j \sim \frac{1}{\left(\frac{j}{2}\right)!}\xi^j = \frac{1}{\left(\frac{j}{2}\right)!}(\xi^2)^{\frac{j}{2}} \tag{42}$$

というオーダーの関係が成り立つ．また $|\varepsilon| < N$ なる任意の N に対して常に $a_N \geq 0$ か，常に $a_N \leq 0$ が成り立っているからプラスマイナスの項が打ち消しあうこともない．よって，

$$H(\xi) = \sum_{j=0}^{\infty} a_j\xi^j \tag{43}$$

$$= \sum_{m=0}^{\infty} a_{2m}\xi^{2m} + \sum_{m=0}^{\infty} a_{2m+1}\xi^{2m+1} \tag{44}$$

$$\sim \sum_{m=0}^{\infty}\frac{1}{\left(\frac{2m}{2}\right)!}(\xi^2)^{\frac{2m}{2}} + \sum_{m=0}^{\infty}\frac{1}{\left(\frac{2m+1}{2}\right)!}(\xi^2)^{\frac{2m+1}{2}} \tag{45}$$

$$\sim \sum_{m=0}^{\infty}\frac{1}{m!}(\xi^2)^m = e^{\xi^2} \tag{46}$$

となるから，$H(\xi) \sim e^{\xi^2}$ となるが，これでは,

$$\phi(\xi) = H(\xi)e^{-\frac{1}{2}\xi^2} \sim e^{\xi^2} \cdot e^{-\frac{1}{2}\xi^2} = e^{\frac{1}{2}\xi^2} \to \infty \tag{47}$$

となってしまい，これでは波動関数が無限遠点で発散してしまうことになり現実の波動を表すことにならない．これは，任意の ε に対しては，波動関数が存在し得ないことを表している．そこで，ε が満たすべき条件と，そのときの波動関数を求めてみよう．

まず，式 (39)，(40) より，$H(\xi)$ は ε が $4\ell+1$ か $4\ell+3$ のときに有限の項の多項式となり，従って $H(\xi)e^{-\frac{1}{2}\xi^2}$ が収束することが分かる．実際に本質的なのは規格化条件より，

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \Psi dx = 1 \tag{48}$$

即ち，

$$\int_{-\infty}^{\infty} \phi^* \phi dx = 1 \tag{49}$$

を満たすように取れることであるが，これは

$$\int_{-\infty}^{\infty} H^*(\xi) H(\xi) e^{-\xi^2} d\xi \tag{50}$$

が収束すればよい訳だが，$H(\xi)$ が有限項の多項式の場合，$|H(\xi)| < Ce^{\xi}$ が適当な定数 C で成り立つから，これは常に満たされている．

結局，$H(\xi)$ が収束する条件は $\varepsilon = 2n+1$ のとき，つまりエネルギー E が，

$$E_n = \varepsilon \times \frac{\hbar\omega}{2} = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega = \left(n + \frac{1}{2}\right)h\nu \tag{51}$$

と表される場合に限ることが分かる．この式より，エネルギー E_n は $h\nu$ の半整数倍となり，最低のエネルギーが $E_0 = h\nu/2$ であることが分かる．この最低のエネルギーをゼロ点エネルギーといい，この状態を基底状態 (ground state) と呼ぶ．

さて，これより，最終的な波動方程式を求めたいが，その前に，$H(\xi)$ の一般形を求めておかねばなるまい．まず，$\varepsilon = 4\ell+1$ のとき，式 (39) より生成される冪級数は有限項で終わる多項式になる．またこの ε に対し，式 (40) より生成される冪級数は無限級数となり，既に述べたより e^{ξ^2} のオーダーになってしてしまうので，条件を満たすためには $a_1 = 0$ とならなければならない．従ってこのとき，$H(\xi)$ は，$m \leq \ell$ のとき，

$$a_{2m} = (-1)^m \frac{\prod_{k=0}^{m-1}[4\ell+1-(4k+1)]}{2m!} a_0 = (-1)^m \frac{\prod_{k=0}^{m-1} 4(\ell-k)}{2m!} a_0 = a_0 (-1)^m 4^m \frac{\ell!}{2m!(\ell-m)!}$$

となり，$m \geq \ell+1$ のとき，$a_{2m} = 0$ となるから，

$$H(\xi) = \sum_{m=0}^{\infty} a_{2m}\xi^{2m} = a_0 \sum_{m=0}^{\ell} (-1)^m 4^m \frac{\ell!}{2m!(\ell-m)!}\xi^{2m} \tag{52}$$

同様に $\varepsilon = 4\ell+3$ のとき，

$$H(\xi) = \sum_{m=0}^{\infty} a_{2m+1}\xi^{2m+1} = a_0 \sum_{m=0}^{\ell} (-1)^m 4^m \frac{\ell!}{(2m+1)!(\ell-m)!}\xi^{2m+1} \tag{53}$$

ここで，この級数解において，積分定数 a_0，a_1 は，規格化するときに一意に定まってしまうので今は考える必要はない．また $E = 2n+1$ において，n が偶数の場合について $\varepsilon = 4\ell+1 = 2n+1$，奇数の場合について $\varepsilon = 4\ell+3$ としたわけだが，これらはガウス記号を用いて，$\ell = \left[\frac{n}{2}\right]$ と表せる．すると，m の動く範囲は $\left[\frac{n}{2}\right]$ から 0 までだから，$m = \left[\frac{n}{2}\right] - r$ と変数変換できる．結局 n に対応する Hermite の微分方程式の級数解を $\overline{H}_n(\xi)$ とすると，

$$\overline{H}_n(\xi) = \sum_{r=0}^{\left[\frac{n}{2}\right]} (-1)^{\left[\frac{n}{2}\right]-r} 4^{\left[\frac{n}{2}\right]-r} \frac{\left[\frac{n}{2}\right]!}{(n-2r)!r!}\xi^{n-2r} = \sum_{r=0}^{\left[\frac{n}{2}\right]} (-1)^{\left[\frac{n}{2}\right]+r} \frac{\left[\frac{n}{2}\right]!}{(n-2r)!r!}(2\xi)^{n-2r} \tag{54}$$

$$= (-1)^{\left[\frac{n}{2}\right]} \frac{\left[\frac{n}{2}\right]!}{n!} \sum_{r=0}^{\left[\frac{n}{2}\right]} (-1)^r \frac{n!}{(n-2r)!r!}(2\xi)^{n-2r} \tag{55}$$

と n の偶奇によらず表せる．ここで一見無駄な最後の行の変形は意味がある．実は (55) 式において，

$$H_n(\xi) \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{r=0}^{\left[\frac{n}{2}\right]} (-1)^r \frac{n!}{(n-2r)!r!}(2\xi)^{n-2r} \tag{56}$$

によって定義されるのが，通常 Hermite 多項式と呼ばれるものであり，従って，一般に $\overline{H}_n(\xi)$ と $H(\xi)$ は，n に依存する定数倍だけ異なることになる．しかし，既に述べたように波動関数を求める際には規格化をするのだから，この定数倍は無視しても全く問題がない．そこで我々は結局規格化前の波動関数（の空間成分）として，

$$\phi(\xi) = H_n(\xi)e^{-\frac{1}{2}\xi^2}, \tag{57}$$

$$\text{但し，} H_n(\xi) = \sum_{r=0}^{\left[\frac{n}{2}\right]} (-1)^r \frac{n!}{(n-2r)!r!}(2\xi)^{n-2r}, \tag{58}$$

$$\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x \tag{59}$$

を得たことになる．

Hermite 多項式の母関数

エルミート多項式は実は次のように母関数から生成できる[3]:

$$E_g(t,\xi) \stackrel{\text{def}}{=} e^{2tx-t^2} \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{n=0}^{\infty} H_n(\xi)\frac{t^n}{n!} \tag{60}$$

これより，e^{2tx-t^2} を t と x について冪級数展開し係数を比較することにより $H_n(\xi)$ が得られることになる．実際，Maclaurin 展開を利用すると，

$$e^{2t\xi-t^2} = e^{2t\xi}\cdot e^{-t^2} = \sum_{s=0}^{\infty}\frac{(2t\xi)^s}{s!}\sum_{r=0}^{\infty}\frac{(-t^2)^r}{r!} = \sum_{\substack{0\le s<\infty\\0\le r<\infty}}(-1)^r\frac{(2\xi)^s}{s!r!}t^{s+2r} = \sum_{n=0}^{\infty}\sum_{r=0}^{\left[\frac{n}{2}\right]}(-1)^r\frac{(2\xi)^{n-2r}}{(n-2r)!r!}t^n$$

最後の変形は，r-s 平面において $r\ge 0$, $s\ge 0$ の格子点について重複も漏れもなく和をとるのだから，$n=s+2r$ という変数変換において，s が偶数のとき r も偶数だから，このとき，

$$r = \frac{n}{2}-\frac{s}{2} = \left[\frac{n}{2}\right]-\left[\frac{s}{2}\right],\ ;$$

一方，s が奇数のとき r も奇数だから，

$$r = \frac{n-s}{2} = \frac{n-1}{2}-\frac{s-1}{2} = \left[\frac{n}{2}\right]-\left[\frac{s}{2}\right],\ ;$$

となるから，結局，

$$r = \left[\frac{n}{2}\right]-\left[\frac{s}{2}\right]$$

の範囲を漏れなく動くことになる．よって上の計算式が成り立つ．

これより，確かに前項で紹介したように，

$$H_n(\xi) = \sum_{r=0}^{\left[\frac{n}{2}\right]} (-1)^r \frac{n!}{(n-2r)!r!}(2\xi)^{n-2r}, \tag{61}$$

$$\tag{62}$$

が得られたことになる．この母関数を用いて，早速波動関数の規格化の準備に取り掛かろう．

Hermite 多項式の直交性と規格化定数

さて続いて，Hermite 多項式の重要な性質である直交性とエルミート多項式を正規化するための規格化定数を両方同時に求めよう．それは，次の式に集約される:

$$\int_{-\infty}^{\infty} H_m(\xi)H_n(\xi)e^{-\xi^2}d\xi = \sqrt{\pi}2^n n!\delta_{mn} \tag{63}$$

この式の意味は明らかであろうが，m と n が異なるとき，この積分の右辺は 0 になり，$n=m$ のとき，$\sqrt{\pi}2^n n!$ になる，つまり，$H_n(\xi)$ を規格化するためにはそのルートである，$\sqrt{\sqrt{\pi}2^n n!}$ で割ってやればいいことになる[4]．

[3]このタイプの母関数は指数型母関数 (exponential generating function) と呼ばれる．
[4]実際には $\xi=\gamma x$ による変数変換の結果，$\sqrt{\gamma}$ 倍されるべきである．

早速 (63) 式の証明に入ろう．この証明には前項で紹介した母関数を使う．いま，

$$E_g(s,\,\xi)E_g(t,\,\xi) = e^{2s\xi - s^2}\cdot e^{2t\xi - t^2} = \sum_{m=0}^{\infty} H_m(\xi)\frac{s^m}{m!}\sum_{n=0}^{\infty} H_n(\xi)\frac{t^n}{n!} = \sum_{n=0}^{\infty}\sum_{m=0}^{\infty} H_m(\xi)\frac{s^m}{m!}H_n(\xi)\frac{t^n}{n!} \tag{64}$$

の両辺に $e^{-\xi^2}$ を掛けて，ξ で $-\infty$ から $+\infty$ まで積分してやると，まず左辺はガウス積分により，

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{2s\xi - s^2 + 2t\xi - t^2 - \xi^2} d\xi = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-[\xi-(s+t)]^2 + 2st} d\xi = e^{2st}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-X^2} dX = \sqrt{\pi}e^{2st} = \sqrt{\pi}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(2st)^n}{n!} \tag{65}$$

であるが，これは次のように変形できる:

$$\sqrt{\pi}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(2st)^n}{n!} = \sqrt{\pi}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{2^n s^n t^n}{n!} = \sqrt{\pi}\sum_{n=0}^{\infty}\sum_{m=0}^{\infty} 2^n\left(\frac{s^m}{m!}\delta_{mn}\right)t^n = \sum_{n=0}^{\infty}\sum_{m=0}^{\infty}\sqrt{\pi}2^n n!\delta_{mn}\frac{s^m}{m!}\frac{t^n}{n!} \tag{66}$$

一方，(64) 式に $e^{-\xi^2}$ を掛けて，ξ で $-\infty$ から $+\infty$ まで積分すると，

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2}\sum_{n=0}^{\infty}\sum_{m=0}^{\infty} H_m(\xi)\frac{s^m}{m!}H_n(\xi)\frac{t^n}{n!}d\xi = \sum_{n=0}^{\infty}\sum_{m=0}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} H_m(\xi)H_n(\xi)e^{-\xi^2}d\xi\frac{s^m}{m!}\frac{t^n}{n!} \tag{67}$$

これと (66) 式の右辺が等しいのだから，

$$\sum_{n=0}^{\infty}\sum_{m=0}^{\infty}\left(\int_{-\infty}^{\infty} H_m(\xi)H_n(\xi)e^{-\xi^2}d\xi - \sqrt{\pi}2^n n!\delta_{mn}\right)\frac{s^m}{m!}\frac{t^n}{n!} = 0 \tag{68}$$

が得られる．ここでこの式は任意の $s,\,t$ で成り立つのだから，$\dfrac{s^m}{m!}\dfrac{t^n}{n!}$ の係数は全て 0 でなければならない．従って，

$$\int_{-\infty}^{\infty} H_m(\xi)H_n(\xi)e^{-\xi^2}d\xi = \sqrt{\pi}2^n n!\delta_{mn} \tag{69}$$

が示された．

調和振動子の波動関数の正規化

これまでの証明によって，調和振動子の波動関数について次のことが示された:

- $\Psi(x,\,t) = \phi(x)T(t)$, 但し，$T(t) = e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$,
- $\phi_n(\xi) = H_n(\xi)e^{-\xi^2}$, 但し，$\xi = \gamma x = \sqrt{\dfrac{m\omega}{\hbar}}x$,
- $H_n(\xi) \overset{\text{def}}{=} \sum_{r=0}^{\left[\frac{n}{2}\right]}(-1)^r\dfrac{n!}{(n-2r)!r!}(2\xi)^{n-2r}$
- $\int_{-\infty}^{\infty} H_m(\xi)H_n(\xi)e^{-\xi^2}d\xi = \sqrt{\pi}2^n n!\delta_{mn}$

さて，以上の結果より，早速 $\Psi(x,\,t)$ を求めよう．まず，規格化条件より，

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{\infty}\Psi^*(x,\,t)\Psi(x,\,t)dx &= \int_{-\infty}^{\infty} T^*(t)\phi^*(x)\phi(x)T(t)dx && (70)\\ &= \int_{-\infty}^{\infty}\phi^*(x)\phi(x)T^*(t)T(t)dx && (71)\\ &= \int_{-\infty}^{\infty}\phi^*(x)\phi(x)e^{i\frac{E}{\hbar}t}e^{-i\frac{E}{\hbar}t}dx && (72)\\ &= \int_{-\infty}^{\infty}\phi^*(x)\phi(x)dx && (73)\\ &= 1 && (74)\end{aligned}$$

が定常状態の波動方程式に対して常に成り立つから，$\phi_n(\xi) \sim \phi_n(x)$ の関係より，$\xi = \gamma x$ で変数変換すると，

$$\int_{-\infty}^{\infty}(\phi_n(\xi))^*\phi_n(\xi)dx = \int_{-\infty}^{\infty} H_n(\xi)H_n(\xi)e^{-\xi^2}dx = \frac{1}{\gamma}\int_{-\infty}^{\infty} H_n(\xi)H_n(\xi)e^{-\xi^2}d\xi = \frac{\sqrt{\pi}2^n n!}{\gamma} \tag{75}$$

以上より，

$$\phi_n(x) = \sqrt{\frac{\gamma}{\sqrt{\pi}2^n n!}}\phi_n(\xi) = \sqrt{\frac{\gamma}{\sqrt{\pi}2^n n!}}H_n(\gamma x)e^{-\frac{1}{2}\gamma^2 x^2}, \tag{76}$$

$$但し，\gamma = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \tag{77}$$

とおけば条件を満たすことが分かる．これが 1 次元調和振動子の最終的な波動関数（の空間成分）である．

求めた解が充分一般的か検討する

さて，我々は既にお互いに直交する波動関数の成分である $\phi_n(x)$ を求めたわけだが，この解が充分に一般的で漏れがないかどうかについては，まだ未検討である．これは線形代数の言葉で言えば，正規直交基底を得たが，それが完全性まで満たしているかどうかが分からないということである．もし，ここでこれまでに得た解が完全性を満たすとすれば，任意の（連続でなめらかな）波動関数がこの解で表せることを意味し，これは全ての基底を得たことになるので，それ以外の解は存在しないことを意味する．これは物理的には，調和振動子の観測の結果を確率的な意味で完全に予測できることを意味するだろう．そこでこの節からは我々が既に得た $\{\phi_n(x)\}_{n\in\mathbb{N}}$ が $-\infty$ から $+\infty$ で定義された任意の連続でなめらかな関数を生成することを示す．

Hermite 多項式の積分表示

Hermite 多項式は,

$$H_n(\xi) = \frac{2^n}{\sqrt{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}(\xi + iu)^n e^{-u^2}du \tag{78}$$

という積分で表すことができる．証明には母関数を使う．

$$\begin{aligned}
\sum_{n=0}^{\infty}\frac{2^n}{\sqrt{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}(\xi + iu)^n e^{-u^2}du\frac{t^n}{n!} &= \frac{1}{\sqrt{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}\sum_{n=0}^{\infty}2^n(\xi + iu)^n\frac{t^n}{n!}e^{-u^2}du && (79)\\
&= \frac{1}{\sqrt{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}e^{2(\xi+iu)t}e^{-u^2}du && (80)\\
&= \frac{1}{\sqrt{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-(u-it)^2-t^2+2\xi t}du && (81)\\
&= e^{2\xi t-t^2}\frac{1}{\sqrt{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-(u-it)^2}du && (82)\\
&= e^{2\xi t-t^2}\frac{1}{\sqrt{\pi}}\cdot\sqrt{\pi} && (83)\\
&= E_g(t,\ \xi) && (84)\\
&= \sum_{n=0}^{\infty}H_n(\xi)\frac{t^n}{n!} && (85)
\end{aligned}$$

以上より，

$$H_n(\xi) = \frac{2^n}{\sqrt{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}(\xi + iu)^n e^{-u^2}du \tag{86}$$

が示された．

Hermite 多項式の完全性の証明

証明は 2 段階に分けて行う．まず，完全な正規直交系であることの充分条件を示そう．

正規直交系 $\{\phi_n(x)\}_{n\in\mathbb{N}}$ が完全であるとき，任意の 2 乗可積分可能な滑らかな関数が展開可能である．即ち，$-\infty$ から $+\infty$ で定義された連続で滑らかな関数が,

$$\int_{-\infty}^{\infty}(f(x))^* f(x)dx \text{ が収束する．} \tag{87}$$

を満たすとき,

$$f(x)=\sum_{n=0}^{\infty}\langle f,\ \phi_n\rangle\phi_n(x)=\sum_{n=0}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}f(y)\phi_n(y)dy\phi_n(x) \tag{88}$$

によって，$f(x)$ は一意に展開できる.

完全な正規直交系であることの充分条件

正規直交系 $\{\phi_n(x)\}_{n\in\mathbb{N}}$ に対して次の等式が成り立つとき，正規直交系 $\{\phi_n(x)\}_{n\in\mathbb{N}}$ は完全である.

$$\sum_{n=0}^{\infty}\phi_n(x)\phi_n(y)=\delta(x-y) \tag{89}$$

以下証明を記す:

$$\begin{aligned}\sum_{n=0}^{\infty}\langle f,\ \phi_n\rangle\phi_n(x)&=\sum_{n=0}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}f(y)\phi_n(y)dy\phi_n(x) &(90)\\ &=\int_{-\infty}^{\infty}f(y)\sum_{n=0}^{\infty}\phi_n(x)\phi_n(y)dy &(91)\\ &=\int_{-\infty}^{\infty}f(y)\delta(x-y)dy &(92)\\ &=f(x) &(93)\end{aligned}$$

最後の変形は直感的には，$\delta(x-y)$ が y の関数としてみた場合，x の近傍だけ関数値が無限大でその下の部分の面積がちょうど 1 になるから，$f(y)\times 1\big|_{y=x}=f(x)$ となることを意味する．$\delta(x)$ はデルタ関数と呼ばれる超関数の一種で，厳密な議論は他の文献にあたってほしい．例えば，[1]L. Schwartz ：超函数の理論 原書第 3 版（岩波書店, 1971）などが詳しい.

Hermite 多項式の完全性の証明

この項では Hermite 多項式の完全性を証明する．なお数学的一般性が分かりやすいように，敢えて波動関数を表す,

$$\phi_n(x)=\sqrt{\frac{1}{2^n n!}\sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}}}H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\right)e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} \tag{94}$$

ではなくて,

$$\varphi_n(x)=\frac{1}{\sqrt{\sqrt{\pi}2^n n!}}H_n(x)e^{-\frac{1}{2}x^2} \tag{95}$$

について証明するが，本質的な意味では変わりはない．以下証明を記す:

$$\sum_{n=0}^{\infty}\varphi_n(x)\varphi_n(y)=\delta(x-y) \tag{96}$$

が示せればよい.

$$\begin{aligned}\sum_{n=0}^{\infty}\varphi_n(x)\varphi_n(y)&=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{\sqrt{\sqrt{\pi}2^n n!}}H_n(x)e^{-\frac{1}{2}x^2}\frac{1}{\sqrt{\sqrt{\pi}2^n n!}}H_n(y)e^{-\frac{1}{2}y^2} &(97)\\ &=\frac{1}{\sqrt{\pi}}e^{-\frac{1}{2}(x^2+y^2)}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{H_n(x)H_n(y)}{2^n n!} &(98)\\ &=\frac{1}{\sqrt{\pi}}e^{-\frac{1}{2}(x^2+y^2)}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{2^n n!}\left(\frac{2^n}{\sqrt{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}(x+iu)^n e^{-u^2}du\right)\left(\frac{2^n}{\sqrt{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}(y+iv)^n e^{-v^2}dv\right) &(99)\\ &=\frac{1}{\pi\sqrt{\pi}}e^{-\frac{1}{2}(x^2+y^2)}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{2^n(x+iu)^n(y+iv)^n}{n!}e^{-u^2-v^2}dvdu &(100)\\ &=\frac{1}{\pi\sqrt{\pi}}e^{-\frac{1}{2}(x^2+y^2)}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}e^{2(x+iu)(y+iv)}\cdot e^{-u^2-v^2}dvdu &(101)\end{aligned}$$

ここで，上の 2 重積分を累次積分にするために，まず，指数の部分を v についてまとめてみると，

$$2(x+iu)(y+iv)-u^2-v^2 = -u^2-v^2+2xy+2ixv+2iyu-2uv \tag{102}$$
$$= -u^2+2xy+2iyu-v^2-2(u-ix)v \tag{103}$$
$$= -u^2+2xy+2iyu-(v+u-ix)^2+(u-ix)^2 \tag{104}$$
$$= -u^2+2xy+2iyu+u^2-2ixu-x^2-(v+u-ix)^2 \tag{105}$$
$$= 2xy-x^2+2i(y-x)u-(v+u-ix)^2 \tag{106}$$

が得られるから，(101) の中の積分は,

$$\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} e^{2(x+iu)(y+iv)}\cdot e^{-u^2-v^2}dvdu = \int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} e^{2xy-x^2+2i(y-x)u-(v+u-ix)^2}dvdu \tag{107}$$
$$= \int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} e^{2xy-x^2+2i(y-x)u-(v+u-ix)^2}dvdu \tag{108}$$
$$= \int_{-\infty}^{\infty} e^{2xy-x^2+2i(y-x)u}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-(v+u-ix)^2}dvdu \tag{109}$$
$$= \int_{-\infty}^{\infty} e^{2xy-x^2+2i(y-x)u}\sqrt{\pi}du \tag{110}$$
$$= \sqrt{\pi}e^{2xy-x^2}\int_{-\infty}^{\infty} e^{i2u(y-x)}du \tag{111}$$
$$= \sqrt{\pi}e^{2xy-x^2}\frac{1}{2}\int_{-\infty}^{\infty} e^{ik(y-x)}dk \tag{112}$$
$$= \sqrt{\pi}e^{2xy-x^2}\frac{1}{2}\cdot 2\pi\delta(y-x) \tag{113}$$
$$= \pi\sqrt{\pi}e^{2xy-x^2}\delta(x-y) \tag{114}$$
$$\tag{115}$$

となる．ここで積分の変数変換 $k=2u$ 及び,

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{ikX}dk = 2\pi\delta(X) \tag{116}$$

を用いた．また最後の変形は $\delta(X)$ が偶関数であることによる．

以上より，(101) 式は,

$$\frac{1}{\pi\sqrt{\pi}}e^{-\frac{1}{2}(x^2+y^2)}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} e^{2(x+iu)(y+iv)}\cdot e^{-u^2-v^2}dvdu = \frac{1}{\pi\sqrt{\pi}}e^{-\frac{1}{2}(x^2+y^2)}\times\pi\sqrt{\pi}e^{2xy-x^2}\delta(x-y) \tag{117}$$
$$= e^{-\frac{1}{2}(x^2+y^2)+2xy-x^2}\delta(x-y) \tag{118}$$

となるが，最後の式は実は $\delta(x-y)$ そのものである．というのも，$x\neq y$ のとき，$\delta(x-y)=0$ よりこの式も 0 となり，$x\simeq y$ のとき,

$$e^{-\frac{1}{2}(x^2+y^2)+2xy-x^2} \simeq e^{-\frac{1}{2}(x^2+x^2)+2x^2-x^2} = e^0 = 1 \tag{119}$$

となるから，$x=y$ の極限では，$\delta(0)$ そのものに近づくからである．この議論は大雑把であるが，もう少し詳しく説明すると，任意の n に対して $|x-y|>\dfrac{1}{n}$ とすると $\delta(x-y)=0$ だから,

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(y)e^{-\frac{1}{2}(x^2+y^2)+2xy-x^2}\delta(x-y)dy = \int_{x-\frac{1}{n}}^{x+\frac{1}{n}} f(y)e^{-\frac{1}{2}(x^2+y^2)+2xy-x^2}\delta(x-y)dy \tag{120}$$

が成り立つ．ここで，n を充分に大きくすると，連続な任意の関数 $f(y)$ はこの区間で殆ど定数，$f(x)$ に近づく．同様に $e^{-\frac{1}{2}(x^2+y^2)+2xy-x^2}$ も定数 $e^{-\frac{1}{2}(x^2+x^2)+2x^2-x^2}=e^0=1$ に近づくから,

$$\int_{x-\frac{1}{n}}^{x+\frac{1}{n}} f(y)e^{-\frac{1}{2}(x^2+y^2)+2xy-x^2}\delta(x-y)dy \simeq \int_{x-\frac{1}{n}}^{x+\frac{1}{n}} f(x)e^0\delta(x-y)dy = f(x)\int_{x-\frac{1}{n}}^{x+\frac{1}{n}}\delta(x-y)dy = f(x) \tag{121}$$

が成り立つのである．これはつまり，$e^{-\frac{1}{2}(x^2+y^2)+2xy-x^2}\delta(x-y)$ が $\delta(x-y)$ そのものであることを示している．

以上により，

$$\sum_{n=0}^{\infty} \phi_n(x)\phi_n(y) = \delta(x-y) \tag{122}$$

つまり (96) 式が成り立つので，(95) 式，

$$\varphi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{\sqrt{\pi}2^n n!}} H_n(x) e^{-\frac{1}{2}x^2} \tag{123}$$

によって定義される正規直交系 $\{\varphi_n(x)\}_{n\in\mathbb{N}}$ は完全であることが示されたので，一次元調和振動子の波動関数は，"完全に" (76) 式の線形結合によって表されることが示された．

最後に，このようにして得られた波動関数の概形をグラフで示そう：

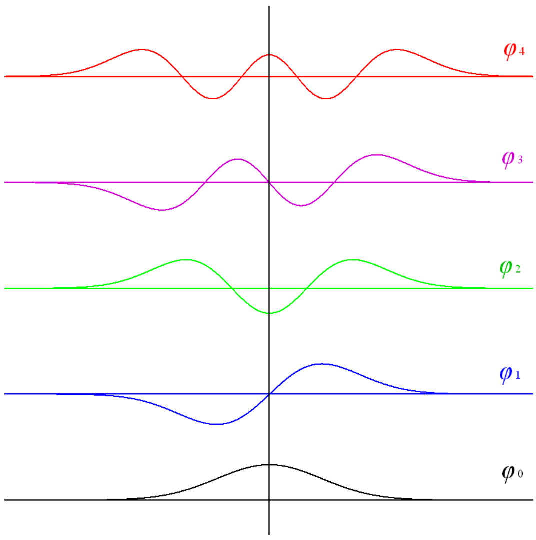

図 1: 波動関数 $\phi_n(x)$ の概形

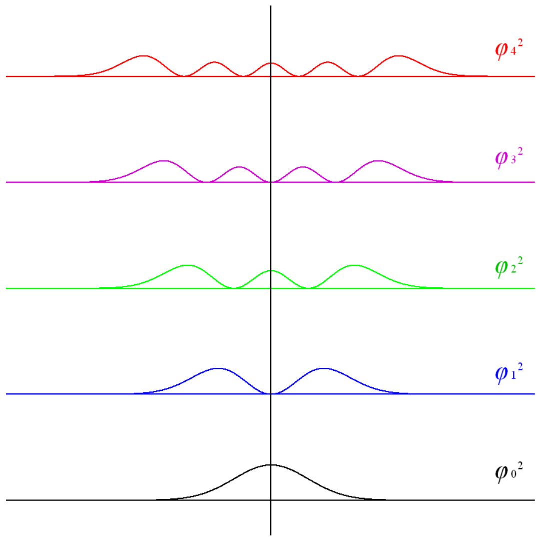

図 2: 存在確率密度 $\phi_n{}^*(x)\phi_n(x) = \phi_n{}^2(x)$ の概形

参考文献

[1] L. Schwartz ：超函数の理論 原書第 3 版（岩波書店, 1971）