

第5章 エルミート関数

エルミート関数は量子力学における調和振動子に関する微分方程式(エルミート微分方程式)の解である。物理学として興味のあるエルミート関数は多項式で表現できるので、エルミート多項式と呼ばれる。本章は、エルミート微分方程式としてエルミート関数を定義し、その性質を調べる。

5.1 エルミート多項式

エルミート微分方程式は、量子力学における1次元の調和振動子に関する微分方程式から導かれる。本章の応用例でエルミート微分方程式を導出するが、その結果は、

$$y''(x) - 2x y'(x) + 2n y(x) = 0, \quad (5.1)$$

のような2階の常微分方程式である。

5.1.1 エルミート微分方程式の級数解

本書でこれまでに用いた処方箋にしたがって、エルミート微分方程式(5.1)の解を級数解にて求めてみよう。つまり、微分方程式の解を、

$$y(x) = \sum_{k=0}^{\infty} c_k x^{p+k}, \quad (5.2)$$

と仮定する。やはり、 p を級数の最低次数であるとし、少なくとも $c_0 \neq 0$ とする。この式を微分方程式(5.1)に代入すると、

$$p(p-1)c_0 z^{p-2} + p(p+1)c_1 z^{p-1} + \sum_{k=0}^{\infty} \left\{ (p+k+2)(p+k+1)c_{k+2} - [2(p+k) - 2n]c_k \right\} x^{p+k} = 0,$$

が得られる。この等式が恒等的に成立するためには、 x のすべての次数の係数がゼロでなければならない。よって、

$$c_{k+2} = \frac{2(p+k) - 2n}{(p+k+2)(p+k+1)} c_k,$$

なる漸化式が得られる。すべての展開係数を決定するには、初期条件として c_0 と c_1 を決めておかなければならない。

既に述べたように、級数の最低次数の係数が c_0 であるので、少なくとも $c_0 \neq 0$ でなければならない。そのとき、 z^{p-2} の項がゼロとなるためには、 $p(p-1) = 0$ が成立する必要がある。つまり、 $p = 0$ 、または、 $p = 1$ でなければならないのだ。さらに、 $p = 1$ ならば $c_1 = 0$ であることも条件となる。一方、 $p = 0$ のとき、 c_1 に対する特別な制限はないが、同様に $c_1 = 0$ として考察を進める。そのとき、前に書いた漸化式から、 $c_1 = c_3 = c_5 = \dots = 0$ となる。よって、展開係数は偶数項 c_{2m} のみを決めてやればよい。

最低次数が0の場合 まず、 $p = 0$ の場合を考えよう。この場合、展開係数は z の偶数次のみがゼロでないと考えられるので、 $u(z)$ の定義を、

$$y(x) = \sum_{k=0}^{\infty} c_{2k} x^{2k},$$

とすることができる。また、展開係数は

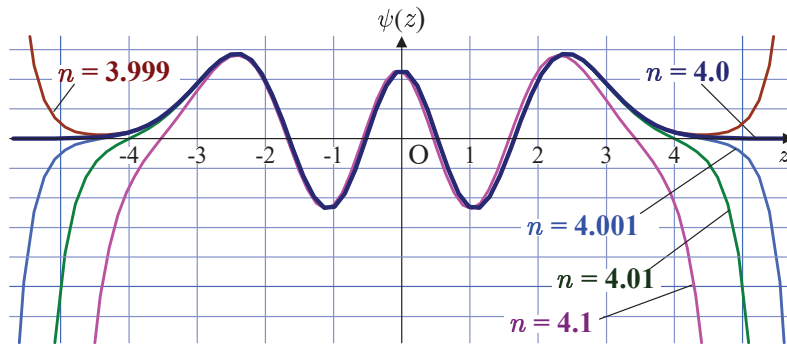
$$c_{2(k+1)} = \frac{4k - 2n}{(k+2)(k+1)} c_{2k}, \quad (5.3)$$

なる漸化式で計算できる。なお、奇数番目の係数はすべてゼロ ($c_{2k+1} = 0$) である。ところで、 $4k - 2n = 0$ を満たせば、漸化式 (5.3) より、 $c_{2(k+1)} = 0$ となり、以降の係数もすべてゼロとなる。この条件を満たすのは n が偶数のときである。この条件を満たせばいい、級数解は有言の多項式となるが、満たさなければ級数は無限に続くことになる。この条件は、量子力学における量子条件に対応する。

量子条件を満たさない場合、調和振動子の波動関数がどうなるか示したのが図 5.1 である。後に説明するが、調和振動子の波動関数 $\psi(x)$ は、エルミート微分方程式の解 $y(x)$ を用いて、 $\psi(x) = y(x)e^{-x^2/2}$ と書かれる。量子力学で波動関数は、確率密度を与える役割があるため、波動関数は無限遠でゼロに収束しなければならない。図 5.1 によると、量子条件を満たす場合 ($n = 4$)、波動関数 $\psi(x)$ は原点の遠方で急激にゼロに収束する。しかし、わずかにその条件からずれただけで遠方で波動関数が発散するのである。

量子条件を満たさない場合の発散の振る舞いを調べてみよう。展開係数 c_{2k} の漸化式に注目し、隣り合う係数の比 c_{2k+2}/c_{2k} を評価すると、

$$\lim_{m \rightarrow \infty} \frac{c_{2k+2}}{c_{2k}} = \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{4k - 2n}{(2k+2)(2k+1)} = \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{1}{k},$$

図 5.1: 波動関数 $\psi(z)$ の発散

が得られる。つまり、展開係数は十分に大きな k については、 k の増加とともに係数が $1/k$ の比率で減少している。しかも、 c_{2k} と c_{2k+2} は同一符号¹である。この振る舞いは e^{x^2} によく似ている。なぜなら、 e^{x^2} は、

$$e^{x^2} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{z^{2k}}{k!},$$

のように級数展開されるからである。この展開式は、 x のべき指数が 2 ずつ上昇し、展開係数が $1/k$ の比率で減少していることを示している。比較までに、 $e^{x^2/2}$ の場合、展開係数は $1/2k$ の比率で減少する。そのような、高次の展開係数の振る舞いは原点の遠方で顕著に現れるはずである。したがって、十分に大きな $|x|$ に対する波動関数 $\psi(x)$ の振る舞いは、

$$\psi(x) = y(x) e^{-x^2/2} \simeq C e^{x^2} \cdot e^{-x^2/2} = C e^{x^2/2},$$

となり、 $|x|$ の増加とともに波動関数が急激に発散するのである。ただし、 C は適切な比例係数²である。このような発散を食い止めるには、展開係数を途中でゼロにするしかなく、そのためには量子条件が必要なのである。

漸化式 (5.3) を繰り返し適用すれば、展開係数の一般項を計算することができる。漸化式を適用するにあたり、量子条件 $n \equiv 2m$ を代入すると、

$$\begin{aligned} c_{2k} &= \frac{-4(m-k+1)}{2k(2k-1)} c_{2k-2} \\ &= \frac{(-4)^2(m-k+1)(m-k+2)}{2k(2k-1)(2k-2)(2k-3)} c_{2k-4} = \cdots \\ &= \frac{(-1)^k 2^{2k} (m-k+1)(m-k+2) \cdots (m-1)m}{2k(2k-1)(2k-2)(2k-3) \cdots 4 \cdot 3 \cdot 2 \cdot 1} c_0 \\ &= \frac{(-1)^k 2^{2k} m!}{(2k)! (m-k)!} c_0, \end{aligned}$$

¹係数が同一符号となるのは $4k > 2n$ のときである。

²特に重要ではないので、その比例係数の値については詮索しないものとする。

が得られる。この結果を用いて多項式 $y(x)$ を記述すると、

$$y_{2m}(x) = \sum_{k=0}^m \frac{(-1)^k 2^{2k} m! c_0}{(2k)! (m-k)!} x^{2k},$$

となる。多項式 $y(x)$ には、 $n (= 2m)$ を媒介変数として付与した。この媒介変数は級数 $y(x)$ の最高次数としての意味がある。

最低次数が1の場合 次に、 $p = 1$ の場合を考察するが、基本的には $p = 0$ の場合と同様である。この場合、展開係数は x の奇数次のみがゼロでないと考えられるので、 $y(x)$ の定義を、

$$y(x) = \sum_{k=0}^{\infty} c_{2k} x^{2k+1},$$

とすることができる。展開係数は、

$$c_{2(k+1)} = \frac{4k+2-2n}{(2k+3)(2k+2)} c_{2k}, \quad (5.4)$$

なる漸化式で計算できる。なお、奇数番目の係数はすべてゼロ ($c_{2m+1} = 0$) である。最低次数が1の場合、 n が奇数、すなわち、 $n \equiv 2m+1$ を満たせば、 $c_{2(n+1)} = 0$ となり、以降の係数もすべてゼロとなる。それが量子条件である。量子条件を満たさない場合、展開係数は無限にゼロにならず、

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{c_{2k+2}}{c_{2k}} = \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{4k+2-2n}{(2k+3)(2k+2)} = \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{1}{k},$$

となる。つまり、多項式 $y(x)$ は e^{x^2} と同様に振舞うので、量子条件を満足しなければ波動関数は原点の遠方で急激に発散する。

この場合についても、漸化式 (5.4) を繰り返し適用し、展開係数の一般項を得ることができる。先ほどと同様なので手順を省略するが、得られた展開係数は、

$$c_{2k} = \frac{(-1)^k 2^{2k} m!}{(2k+1)! (m-k)!} c_0,$$

である。なお、ここでは量子条件 $n \equiv 2m+1$ を適用した。この展開係数を用いて、 $y(x)$ の展開式を記述すると、

$$y_{2m+1}(x) = \sum_{k=0}^m \frac{(-1)^k 2^{2k} m! c_0}{(2k+1)! (m-k)!} x^{2k+1},$$

となる。 $y(x)$ に付与した添え字は、多項式の最高次数を表す。

多項式 $y(x)$ の最低次数が 0 次と 1 次の場合について個別に考察したが, 多項式 $y_{2m}(x)$ と $y_{2m+1}(x)$ は統一形式で記述できる。その統一形式を $H_n(x)$ なる記号で書くことにすると,

$$H_n(z) = \sum_{k=0}^{\lfloor n/2 \rfloor} \frac{(-1)^k n!}{(n-2k)! k!} (2z)^{n-2k}, \quad (5.5)$$

となる。この統一形式による多項式を **エルミート多項式** と呼ばれる。上での考察では, $y_{2m}(x)$ や $y_{2m+1}(x)$ の数式に含まれる媒介変数 k は $2x$ のべき指数が上昇する順になるように設定していたが, ここでは, 統一記述のためべき指数が n から下降する順に設けている。しかし, 総和記号の中身を展開して書くと, ここに書いた $H_n(x)$ は考察時の数式と一致するはずである。なお, この展開式を用いた場合, 先ほど用いた最低次数の係数 c_0 とは,

$$c_0 = \begin{cases} \frac{(-1)^{n/2} n!}{(n/2)!} & \text{if } n \text{ is even,} \\ \frac{(-1)^{(n-1)/2} 2 n!}{((n-1)/2)!} & \text{if } n \text{ is odd,} \end{cases}$$

のように関係づけられる。

5.2 母関数と漸化式

他の関数と同様に, エルミート多項式も母関数を用いると, 性質を調べる上で便利なが多い。本節ではエルミート多項式の母関数を特定し, エルミート多項式 $H_n(x)$ の異なる次数 n の間での関係式を導出する。

5.2.1 指数型母関数

エルミート多項式 $H_n(x)$ については, 性質を調べる目的で指数型の母関数が適している。最初に結果を示しておく,

$$\sum_{n=0}^{\infty} H_n(x) \frac{t^n}{n!} = e^{-t^2+2xt}, \quad (5.6)$$

となる。本項ではこの関係を証明する。

前節で記述したエルミート多項式の展開式を用いて, エルミート多項式を展開すると,

$$\begin{aligned} \sum_{n=0}^{\infty} H_n(x) \frac{t^n}{n!} &= \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\lfloor n/2 \rfloor} \frac{(-1)^m n!}{(n-2m)! m!} (2x)^{n-2m} \frac{t^n}{n!} \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\lfloor n/2 \rfloor} \frac{(-1)^m}{(n-2m)! m!} (2x)^{n-2m} t^n, \end{aligned}$$

となる。ここから計算を進めるには、総和の順序を入れ替える。母関数を計算するために、媒介変数 n を 0 から無限大まで、 n を 0 から $\lfloor n/2 \rfloor$ まで増加させながら総和をとる。この総和をとる添え字の格子点を描くと図 5.2 のようになる。この図では、 n を斜線で、 m を縦軸にとっている。まず、 n を固定し、破線に沿って、右下から左上へ格子点をたどって総和をとる。最も左上に到達したら n を増加させ、同様の操作を繰り返す。図示した経路をたどれば、最も左上の格子点では $m = \lfloor n/2 \rfloor$ となっていることに注意するとよい。これを

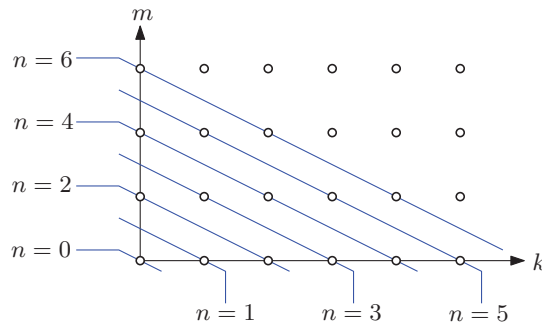


図 5.2: 母関数計算のための媒介変数の格子点

無限に繰り返せば、格子点すべてを取り尽くすことになる。つまり、総和の順序を変え、まず、最も左の列の下から上に格子点を取り尽くし、列を右に移し、同様の操作を繰り返しても、総和の結果は同じである。この格子点に対して、横軸に k をとれば、 $k = n - 2m$ なる関係がある。この関係に注意して計算を続けると、

$$\begin{aligned} \text{RHS} &= \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-1)^m}{k! m!} (2z)^k t^{2m+k} \\ &= \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-1)^m t^{2m}}{m!} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(2tx)^k}{k!} = e^{-t^2} e^{2xt} = e^{-t^2+2xt}, \end{aligned}$$

が得られるので、(5.6) が証明できた。◀

5.2.2 漸化式と多項式の特定

前項で導出したエルミート多項式の母関数を利用すると、エルミート関数の漸化式を得ることができる。結果的に得られる漸化式は、

$$H_{n+1}(x) = 2x H_n(x) - 2n H_{n-1}(x), \quad (5.7)$$

$$H'_n(x) = 2n H_n(x), \quad (5.8)$$

である。これらの漸化式はともに、母関数を微分することによって導出できる。

まず, (5.6) を t について微分すると,

$$\begin{aligned} \sum_{n=0}^{\infty} H_n(x) \frac{t^{n-1}}{(n-1)!} &= (-2t + 2x) e^{-t^2+2xt} \\ &= -2 \sum_{n=0}^{\infty} H_n(x) \frac{t^{n+1}}{n!} + 2x \sum_{n=0}^{\infty} H_n(x) \frac{t^n}{n!}, \end{aligned}$$

が得られる。この式の両辺に対して t^n の係数を比較すると, (5.7) が導出できる。引き続き, (5.6) を z について微分すると,

$$\sum_{n=0}^{\infty} H'_n(x) \frac{t^n}{n!} = 2t e^{-t^2+2xt} = 2 \sum_{n=0}^{\infty} H_n(x) \frac{t^{n+1}}{n!},$$

がえられる。この式についても同様に t^n の係数を比較すると, (5.8) が導出できる。

母関数と得られた漸化式を用いると, 各次数のエルミート多項式を順次, 特定することができる。まず, 母関数に $t = 0$ を代入すると, $H_0(z) = 1$ が容易に得られる。この結果を (5.8) に代入して, $H_1(x) = 2x$ が得られる。さらに, これらの結果を (5.7) に代入すると, $H_2(x) = 4x^2 - 2$ が得られる。以降, (5.7) を繰り返すとエルミート多項式が順次, 得られる。このようにして得られるエルミート多項式の例を下に挙げておく。

$$\begin{aligned} H_0(x) &= 1, & H_1(x) &= 2x, \\ H_2(x) &= 4x^2 - 2, & H_3(x) &= 8x^3 - 12x, \\ H_4(x) &= 16x^4 - 48x^2 + 12, \\ H_5(x) &= 32x^5 - 160x^3 + 120x, \\ H_6(x) &= 64x^6 - 480x^4 + 720x^2 - 120. \end{aligned}$$

母関数から, エルミート多項式のパリティに関する性質も明らかになる。母関数 e^{-t^2+2xt} は, $t \mapsto -t$ と $x \mapsto -x$ の双方の置き換えによって値を変化させない。つまり,

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

であるから, 左辺と右辺で t^n の係数を比較することによって, パリティの関係式:

$$H_n(-x) = (-1)^n H_n(x), \quad (5.9)$$

が導出される。

5.2.3 ロドリグ表示

ルジャンドル多項式と同様に、エルミート多項式もロドリグ表示ができる。ロドリグ表示によると、エルミート多項式は、

$$H_n(x) = (-1)^n e^{x^2/2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2/2}, \quad (5.10)$$

によって計算できる。

ロドリグ表示は母関数によって証明できる。母関数の展開式(5.6)より、

$$H_n(x) = \left. \frac{d^n}{dt^n} e^{-t^2+2xt} \right|_{t=0},$$

で計算できることは明らかである。この数式は、コーシーの積分公式を用いると、

$$H_n(x) = \frac{(-1)^n n!}{2\pi i} \oint \frac{e^{-t^2+2xt}}{t^{n+1}} dt,$$

のように書き換えることができる。この式の積分路は原点を左回りに周回する任意の単純閉曲線である。この式の右辺を計算すると、

$$\begin{aligned} \text{RHS} &= \frac{(-1)^n n!}{2\pi i} e^{x^2} \oint \frac{e^{-(t-x)^2}}{t^{n+1}} dt = \frac{(-1)^n n!}{2\pi i} e^{x^2} \oint \frac{e^{-\xi^2}}{(\xi+x)^{n+1}} d\xi \\ &= \frac{(-1)^n}{2\pi i} e^{x^2} \left. \frac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2} \right|_{\xi=x} = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2}, \end{aligned}$$

のように変形される。ここで、 $\xi \equiv t - x$ なる置き換えを適用した。これによって、エルミート多項式のロドリグ表示が導出された。

5.3 直交性

本節ではエルミート多項式の直交性について調べる。結果的には、エルミート多項式 $H_n(x)$ は単独で直交性を示さず、 $H_n(x) e^{-x^2/2}$ が直交性を示す。本節で導出する関係式は、

$$\int_{-\infty}^{\infty} H_m(x) H_n(x) e^{-x^2} dx = 2^n \pi^{1/2} n! \delta_{nm}, \quad (5.11)$$

である。この関係式は、量子力学の調和振動子の波動関数の規格化に用いられる。

エルミート多項式 $H_n(x)$ と $e^{-x^2/2}$ の積は量子力学の調和振動子の波動方程式 $\psi_n(x)$ となるので、シュレーディンガー方程式の解である。量子力学の調和振動子は、エルミート

微分方程式が無限遠で発散しないよう、量子条件を満たすはずである。後に、応用例として示すが、調和振動子に関するシュレーディンガーの方程式は、

$$\frac{d^2\psi_n}{dx^2} + (2n + 1 - x^2)\psi_n = 0,$$

となる。この方程式の中の n が整数であることが量子条件である。この方程式に異なる量子数 m と n を仮定して、両者の方程式を並べて書くと、

$$\begin{aligned}\frac{d^2\psi_m}{dx^2} + (2m + 1 - x^2)\psi_m &= 0, \\ \frac{d^2\psi_n}{dx^2} + (2n + 1 - x^2)\psi_n &= 0,\end{aligned}$$

となる。前者に ψ_n を、後者に ψ_m を乗じて差をとると、

$$\frac{d}{dx} [\psi'_m(x)\psi_n(x) - \psi_m(x)\psi'_n(x)] + 2(m - n)\psi_m(x)\psi_n(x) = 0,$$

が得られる。この式を実数全体にわたって積分すると、

$$\left[\psi'_m(x)\psi_n(x) - \psi_m(x)\psi'_n(x) \right]_{-\infty}^{\infty} + 2(m - n) \int_{-\infty}^{\infty} \psi_m(x)\psi_n(x) dx = 0,$$

となる。エルミート多項式 $H_n(x)$ が有限次数の多項式であるので、それを $e^{-x^2/2}$ 倍した $\psi_n(x)$ は $x = \pm\infty$ でゼロである。したがって、上の積分の左辺の第1項がゼロとなるので、

$$(m - n) \int_{-\infty}^{\infty} \psi_m(x)\psi_n(x) dx = 0,$$

が成立することになる。まず、 $m = n$ のとき、この等式が成立するのは当然であるが、 $m \neq n$ の場合にこの等式が成立するには、

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_m(x)\psi_n(x) dx = 0, \quad (m \neq n)$$

の成立が必要である。つまり、異なる次数の波動関数が直交することが示された。

それでは、 $m = n$ のときの積分値を特定しよう。そのために、母関数表示：

$$\begin{aligned}\sum_{n=0}^{\infty} H_n(x) \frac{t^n}{n!} &= e^{-t^2+2xt}, \\ \sum_{n=0}^{\infty} H_n(x) \frac{s^n}{n!} &= e^{-s^2+2xs},\end{aligned}$$

を利用する。この2つの数式の積をとり、さらに、 e^{-x^2} 倍すれば、

$$\sum_{n=0}^{\infty} [H_n(x)]^2 e^{-x^2} \frac{(st)^n}{(n!)^2} = e^{-t^2-x^2-s^2+2xt+2xs} = e^{-(x-s-t)^2} e^{2st},$$

となる。この両辺を実数全体にわたって積分すると、

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{(st)^n}{(n!)^2} \int_{-\infty}^{\infty} [H_n(x)]^2 e^{-x^2/2} dx = \sqrt{\pi} e^{2st} = \sqrt{\pi} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{2^n (st)^n}{n!},$$

が得られる。すべての n に対して項別に等号で結ぶと、

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

が導出される。したがって、エルミート多項式の直交性 (5.11) が証明された。この積分値は量子力学の波動関数の規格化係数を決めるのに役立つ。なぜなら、量子力学では、 $|\psi_n(x)|^2 = [H_n(x)]^2 e^{-x^2}$ は確率密度としての意味があるからである。つまり、量子力学の調和振動子の波動関数は、

$$\psi_n(x) = \frac{e^{-x^2/2}}{2^{n/2} \pi^{1/4} (n!)^{1/2}} H_n(x),$$

のように規格化される。こうすれば、 $|\psi_n(x)|^2$ を実数全体にわたって積分した結果が 1 となり、確率密度として意味づけられるのである。

5.4 量子力学における調和振動子

エルミート関数の応用例として量子力学における調和振動子を考えよう。調和振動子は、変位 x の自乗に比例するポテンシャルによってつくられる運動をする振動子である。このように書くとわかりにくいだが、ポテンシャル $V(x) = kx^2/2$ によって運動形態が決められる振動子のことである。つまり、単振動のことである³。

5.4.1 シュレーディンガーの方程式

振動子の質量を m とすれば、振動の角周波数が $\omega = \sqrt{k/m}$ であることが容易にわかる。比例係数 k の代わりに角周波数 ω を用いると、ポテンシャルは $V(x) = m\omega^2 x^2/2$ となる。振動子の前エネルギーを E とすると、古典力学では、

$$\frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} = E,$$

が成立する。ここで、 p は振動子の運動量である。量子力学では、これをシュレーディンガーの方程式で書き換える。シュレーディンガーの方程式では、

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} \right] \psi(x) = E\psi(x), \quad (5.12)$$

³振動子に作用する力が $-kx^2$ であるので、運動方程式が $\ddot{x} = (k/m)x$ と書けるから、その解は $x = C e^{i\sqrt{k/m}t}$ となる。ただし、 C は定数である。

のように記述できる。ここで、 $\psi(x)$ は振動子の波動関数であり、 \hbar はプランク定数である。この方程式の第1項が運動量の自乗にあたる。この方程式を解くにあたり、

$$z \equiv \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x, \quad \epsilon \equiv \frac{E}{\hbar\omega},$$

の置き換えをすると、シュレーディンガーの方程式は、

$$\frac{d^2\psi}{dz^2} + (2\epsilon - z^2)\psi = 0, \quad (5.13)$$

のように書き換えられる。ここで、 z と ϵ は、ともに無次元量であり、前者を規格化座標、後者を規格化エネルギーと呼ぶことにしよう。

5.4.2 調和振動子の波動関数

シュレーディンガーの方程式 (5.13) は、無限遠 ($z \rightarrow \infty$) で $\psi \simeq e^{-z^2/2}$ のように振舞う。これは、 $z \rightarrow \infty$ のとき、 $\psi'' - z^2\psi = 0$ が近似的に成立すると考えれば導かれる。それを引き継ぎ、方程式 (5.13) の一般解は $u(z)e^{-z^2/2}$ の形をしていると仮定しよう。これを、(5.13) に代入すると、

$$\frac{d^2u}{dz^2} - 2z\frac{du}{dz} + (2\epsilon - 1)u = 0, \quad (5.14)$$

が得られる。つまり、この方程式の解となる $u(z)$ が得られれば調和振動子の波動関数が特定できることになる。

微分方程式 (5.14) の解は、 $2\epsilon - 1 = 2n$ (n は整数) を満たさなければ、波動関数 $u(z)e^{-z^2/2}$ が原点の遠方で発散する。それは、本章で既に説明したとおりである。そのときの解は、 $u(z) = H_n(z)$ となるので、波動方程式は、

$$\psi_n(z) = C H_n(z) e^{-z^2/2},$$

である。ここで、 C は定数であり、 $|\psi_n(z)|^2$ が確率密度を与えるように決定すればよい。波動関数は、第5.3節で既に規格化されていて、

$$\psi_n(z) = \frac{e^{-z^2/2}}{2^{n/2}\pi^{1/4}n!} H_n(z)$$

が得られている。この規格化は $|\psi_n(z)|^2$ を実数全体で積分した値が1になるように振幅調整されている。なお、波動関数 $\psi_n(z)$ は正規化エネルギーが $\epsilon = n + 1/2$ の場合に対応する解である。ただし、 n はゼロ以上の整数である。つまり、量子力学では全エネルギーが、

$$E = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega,$$

を満たさなければ解が存在しないのである。その条件を量子条件と呼び、 n を量子数と呼ぶ。量子力学では、古典力学で現れないような現象が現れる。

量子力学の波動関数は、振幅の自乗 $|\psi_n(z)|^2$ が確率密度を表す。上に記述した波動関数は、その意味に合致するよう、実数全体にわたって積分した値が1になるように規格化してある。そのように計算した調和振動子の確率密度関数は図5.3のようになる。図の横軸は規格化座標 z 、縦軸は規格化エネルギー ϵ である。図中の放物線は、調和振動子のポテンシャルエネルギー $\epsilon = z^2/2$ である。前に説明したように、 $\epsilon = n + 1/2$ の場合しか波動関数が存在しない。最も、低いエネルギー状態はゼロのエネルギーではなく、 $\epsilon = 1/2$ であ

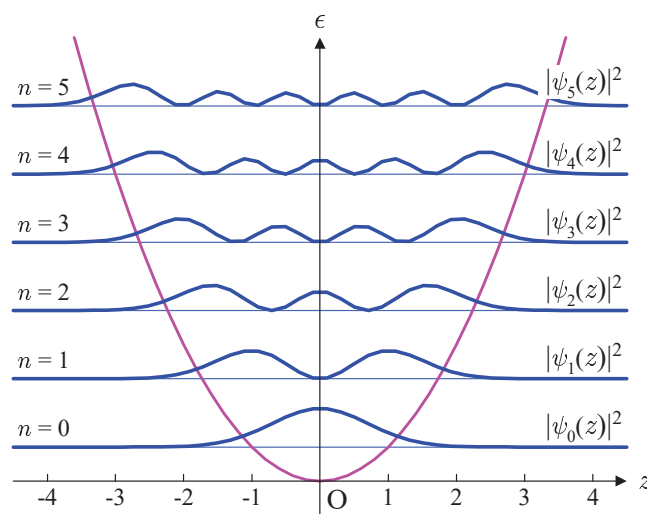


図 5.3: 調和振動子の確率密度

る⁴。一方、波動関数から計算できる確率密度関数を、ゼロから5までの量子数について図示している。古典力学では、図中の放物線の外側、すなわち、ポテンシャルエネルギーが振動子のエネルギーを超える領域では振動子が存在できないので確率密度がゼロになる。しかし、量子力学では外側の領域にも確率密度がにじみ出している。また、放物線の内側の領域でも、確率密度が変動し、調和振動子の存在確率がゼロになる場所があることも古典力学との相違点である。

量子数が大きい状態、つまり、エネルギーが大きい状態では確率密度は古典力学から計算できる結果に近くなる。単振動する振動子を見出す確率は、振動の端と中央ではどちらが高いだろうか？ 正解は、振動の端で振動子を見出す確率が高い。なぜなら、振動の中央では振動子の速度が最大であるが、端ではゼロになるからである。古典力学から導かれる振動子の確率密度 $p(x)$ は、

$$p(x) = \frac{1}{\pi \sqrt{2\epsilon - z^2}},$$

となる。この古典的な確率密度と、量子数 $n = 40$ の確率密度を図5.4に比較する。量

⁴これは、量子力学における不確定性原理に関係している。

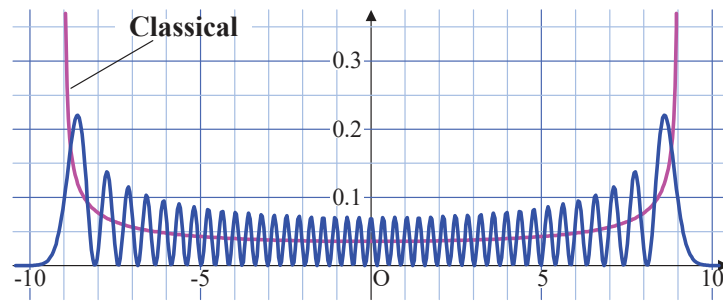


図 5.4: 高い量子数 ($n = 40$) の確率密度と古典的確率密度の比較

量子力学における確率密度は、ゼロ点を含み振動を繰り返している。古典力学における確率密度は、その振動の中心を通っているのがこの図からわかるだろう。