2007年7月18日

３．調和振動子
Harmonic oscillator

３－１　一次元調和振動子
One-dimensional harmonic oscillator

一次元調和振動子のハミルトニアンは

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x) \tag{3.1.1}$$

$$V(x) = \frac{\kappa x^2}{2} \tag{3.1.2}$$

と表される。エネルギー固有値は

$$E_n = h\nu_0\left(n + \frac{1}{2}\right) \quad [n = 0,1,2,3,\cdots] \tag{3.1.3}$$

である。ここで，ν_0 は古典的な固有振動数であり，

$$\nu_0 = \frac{1}{2\pi}\sqrt{\frac{\kappa}{m}} \tag{3.1.4}$$

と表される。

波動関数は

$$\psi_n(x) = \left(\frac{\alpha}{\pi^{1/2}2^n n!}\right)^{1/2} H_n(\alpha x)\exp\left(-\frac{\alpha^2 x^2}{2}\right) \tag{3.1.5}$$

$$\alpha = \left(\frac{m\kappa}{\hbar^2}\right)^{1/4}$$

と表される。ここで $H_n(\xi)$ はエルミート多項式で

$$H_n(\xi) = (-1)^n \exp\left(\xi^2\right)\frac{\partial^n}{\partial\xi^n}\exp\left(-\xi^2\right)$$

で定義される。

－－

付録３－１　一次元調和振動子

一次元調和振動子のハミルトニアンは

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x) \tag{A3.1.1}$$

$$V(x) = \frac{1}{2}\kappa x^2 \tag{A3.1.2}$$

と表される。ここで，κ は力の定数である。

$$\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1.05457168(18) \times 10^{-34} \quad [\mathrm{J \cdot s}]$$

はプランク定数

$$h = 6.62606896(33) \times 10^{-34} \quad [\mathrm{J \cdot s}]$$

を 2π で割ったものであり，ディラック定数とも呼ばれる。

波動関数を $\psi(x)$ とすれば，シュレーディンガー方程式は

$$\hat{H}\psi(x) = E\psi(x)$$

$$\Leftrightarrow -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{\kappa}{2}x^2\psi(x) = E\psi(x)$$

$$\Leftrightarrow \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E - \frac{\kappa}{2}x^2\right)\psi(x) = 0$$

$$\Leftrightarrow \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \left[\frac{2mE}{\hbar^2} - \frac{m\kappa}{\hbar^2}x^2\right]\psi(x) = 0$$

で与えられる。

$\psi(x) = u(\xi)$ として，

$$\frac{d^2u(\xi)}{d\xi^2} + \left(\varepsilon - \xi^2\right)u(\xi) = 0$$

の形にするためには，まず

$$x = \frac{\xi}{\alpha} = \left(\frac{\hbar^2}{m\kappa}\right)^{1/4}\xi \Leftrightarrow \xi = \alpha x = \left(\frac{m\kappa}{\hbar^2}\right)^{1/4}x$$

として，

$$\frac{\sqrt{m\kappa}}{\hbar}\frac{d^2u(\xi)}{d\xi^2} + \left(\frac{2mE}{\hbar^2} - \frac{\sqrt{m\kappa}\xi^2}{\hbar}\right)u(\xi) = 0$$

$$\Leftrightarrow \frac{d^2u(\xi)}{d\xi^2} + \left(\frac{2mE}{\hbar\sqrt{m\kappa}} - \xi^2\right)u(\xi) = 0$$

$$\Leftrightarrow \frac{d^2u(\xi)}{d\xi^2} + \left(\frac{2}{\hbar}\sqrt{\frac{m}{\kappa}}E - \xi^2\right)u(\xi) = 0$$

となる。古典的な固有振動数

$$\nu_0 = \frac{1}{2\pi}\sqrt{\frac{\kappa}{m}}$$

を使って，

$$\frac{d^2u(\xi)}{d\xi^2} + \left(\frac{2}{\hbar \cdot 2\pi\nu_0}E - \xi^2\right)u(\xi) = 0$$

$$\Leftrightarrow \frac{d^2u(\xi)}{d\xi^2} + \left(\frac{2E}{h\nu_0} - \xi^2\right)u(\xi) = 0$$

とも書ける。

$$\frac{2E}{h\nu_0} = \varepsilon \Leftrightarrow E = \frac{h\nu_0\varepsilon}{2}$$

とすれば，

$$\frac{d^2u(\xi)}{d\xi^2} + \left(\varepsilon - \xi^2\right)u(\xi) = 0$$

となる。

$$u(\xi) = \exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right)H(\xi)$$

とすると，

$$\frac{du(\xi)}{d\xi} = -\xi\exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right)H(\xi) + \exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right)H'(\xi)$$

$$\begin{aligned}\frac{d^2u(\xi)}{d\xi^2} &= -\exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right)H(\xi) + \xi^2\exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right)H(\xi) - \xi\exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right)H'(\xi) \\ &\quad -\xi\exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right)H'(\xi) + \exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right)H''(\xi) \\ &= \left(\xi^2-1\right)\exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right)H(\xi) - 2\xi\exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right)H'(\xi) + \exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right)H''(\xi)\end{aligned}$$

これを

$$\frac{d^2u(\xi)}{d\xi^2} + \left(\varepsilon - \xi^2\right)u(\xi) = 0$$

に代入して

$$\left(\xi^2-1\right)\exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right)H(\xi) - 2\xi\exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right)H'(\xi) + \exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right)H''(\xi) + \left(\varepsilon-\xi^2\right)\exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right)H(\xi) = 0$$

$$\Leftrightarrow (\varepsilon-1)H(\xi) - 2\xi H'(\xi) + H''(\xi) = 0$$

$$\Leftrightarrow H''(\xi) - 2\xi H'(\xi) + (\varepsilon-1)H(\xi) = 0$$

この最後の式はヘルミート Hermite の微分方程式の形になっている。

$$H(\xi) = \xi^s\left(a_0 + a_1\xi + a_2\xi^2 + \cdots\right) \quad a_0 \neq 0 \quad s \geq 0$$

$$\Leftrightarrow H(\xi) = \sum_{\nu=0}^{\infty} a_\nu \xi^{s+\nu}$$

の形の解を求める。

$$H'(\xi) = \sum_{\nu=1}^{\infty} (s+\nu)a_\nu \xi^{s+\nu-1}$$

$$H''(\xi) = \sum_{\nu=2}^{\infty} (s+\nu)(s+\nu-1)a_\nu \xi^{s+\nu-2}$$

を

$$H''(\xi) - 2\xi H'(\xi) + (\varepsilon-1)H(\xi) = 0$$

に代入すれば，

$$\sum_{\nu=0}^{\infty} (s+\nu)(s+\nu-1)a_\nu \xi^{s+\nu-2} - 2\xi\sum_{\nu=0}^{\infty} (s+\nu)a_\nu \xi^{s+\nu-1} + (\varepsilon-1)\sum_{\nu=0}^{\infty} a_\nu \xi^{s+\nu} = 0$$

$$\Leftrightarrow \sum_{\nu=0}^{\infty} (s+\nu)(s+\nu-1)a_\nu \xi^{s+\nu-2} - 2\sum_{\nu=0}^{\infty} (s+\nu)a_\nu \xi^{s+\nu} + (\varepsilon-1)\sum_{\nu=0}^{\infty} a_\nu \xi^{s+\nu} = 0$$

この等式が常に成立するためには，ξ の各ベキ乗の係数がすべてゼロにならなければいけないので，

$$s(s-1)a_0 = 0$$

$$(s+1)sa_1 = 0$$

$$(s+2)(s+1)a_2 - (2s+1-\varepsilon)a_0 = 0$$

$$(s+3)(s+2)a_3 - (2s+3-\varepsilon)a_1 = 0$$

$$\cdots\cdots\cdots\cdots$$

$$(s+\nu+2)(s+\nu+1)a_{\nu+2} - (2s+2\nu+1-\varepsilon)a_\nu = 0$$

$\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots$

$a_0 \neq 0$ としているので，１番目の式から $s=0$ または $s=1$ であるが，２番目の式からは $s=0$ または $a_1=0$ である。最後の式から，

$$a_{\nu+2} = \frac{2s+2\nu+1-\varepsilon}{(s+\nu+2)(s+\nu+1)} a_\nu$$

という漸化式が得られる。

$$\frac{a_{\nu+2}}{a_\nu} \xrightarrow[\nu\to\infty]{} \frac{2}{\nu}$$

となるが，有限の n に対して

$$\xi^n \exp\left(\xi^2\right) = \xi^n + \frac{\xi^{n+2}}{1!} + \frac{\xi^{n+4}}{2!} + \cdots + \frac{\xi^\nu}{[(\nu-n)/2]!} + \frac{\xi^{\nu+2}}{[(\nu-n)/2+1]!} + \cdots$$

から，

$$\varepsilon = 2s+2\nu+1$$

が成立して級数が有限で終わらない場合には，関数が $|\xi|$ の大きい所で発散してしまうことがわかる。$a_0 \neq 0$ から，ν は偶数でなければならない。s は 0 または 1 の値をとることができ，それぞれに対応して $\varepsilon = 2\nu+1$ または $\varepsilon = 2\nu+3$ となる（ν は偶数であることに注意する）。両方の場合を合わせて，量子数 n を使って，

$$\varepsilon = \varepsilon_n = 2n+1 \quad [n = 0,1,2,\cdots]$$

と表すことができる。

したがって，エネルギー固有値を

$$E = E_n = \frac{h\nu_0 \varepsilon_n}{2} = \left(n+\frac{1}{2}\right) h\nu_0 \quad [n = 0,1,2,\cdots]$$

と書くことができる。

次数 n で方程式

$$H''(\xi) - 2\xi H'(\xi) + (\varepsilon-1)H(\xi) = 0$$

の $\varepsilon = 2n+1$ の場合

$$H_n''(\xi) - 2\xi H_n'(\xi) + 2nH_n(\xi) = 0$$

の解となる多項式はエルミート多項式 Hermite polynomial と呼ばれる。

エルミート多項式は母関数 generating function

$$S(\xi,s) = \exp\left[\xi^2 - (s-\xi)^2\right] = \exp\left(-s^2+2s\xi\right) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_n(\xi)}{n!} s^n$$

の n 階微分の係数としても表される。また，

$$H_n(\xi) = \left[\frac{\partial^n S(\xi,s)}{\partial s^n}\right]_{s=0} = (-1)^n \exp\left(\xi^2\right) \frac{\partial^n}{\partial \xi^n} \exp\left(-\xi^2\right)$$

とも書ける。

$$H_0(\xi) = 1,$$

$$H_1(\xi) = 2\xi,$$

$$H_2(\xi) = 4\xi^2 - 2,$$

$$H_3(\xi) = 8\xi^3 - 12\xi,$$

$$H_4(\xi)=16\xi^4-48\xi^2+12,$$
$$H_5(\xi)=32\xi^5-160\xi^3+120\xi,$$
$$H_6(\xi)=64\xi^6-480\xi^4+720\xi^2-120,$$
$$H_7(\xi)=128\xi^7-1344\xi^5+3360\xi^3-1680\xi,$$
$$H_8(\xi)=256\xi^8-3584\xi^6+13440\xi^4-13440\xi^2+1680,$$
$$H_9(\xi)=512\xi^9-9216\xi^7+48384\xi^5-80640\xi^3+30240\xi,$$
$$H_{10}(\xi)=1024\xi^{10}-23040\xi^8+161280\xi^6-403200\xi^4+302400\xi^2-30240,\ \cdots$$
など。

漸化式　$H_{n+1}(\xi)=2\xi H_n(\xi)-2nH_{n-1}(\xi)$

直交関係　$\displaystyle\int_{-\infty}^{\infty}\exp(-\xi^2)H_n(\xi)H_m(\xi)d\xi=\begin{cases}0 & [m\neq n]\\ \sqrt{\pi}2^n n! & [m=n]\end{cases}$

などの関係がある。

一次元調和振動子の波動関数を
$$\psi_n(x)=N_n u_n(\xi)$$
$$u_n(\xi)=\exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right)H_n(\xi)$$
$$x=\frac{\xi}{\alpha}=\left(\frac{\hbar^2}{m\kappa}\right)^{1/4}\xi\Leftrightarrow\xi=\alpha x=\left(\frac{m\kappa}{\hbar^2}\right)^{1/4}x$$
とすれば，
$$\int_{-\infty}^{\infty}\psi_n^*(x)\psi_m(x)dx=N_n^*N_m\int_{-\infty}^{\infty}u_n^*(\xi)u_m(\xi)\frac{d\xi}{\alpha}$$
$$=\frac{N_n^*N_m}{\alpha}\int_{-\infty}^{\infty}\exp(-\xi^2)H_n(\xi)H_m(\xi)d\xi=\frac{N_n^*N_m}{\alpha}\begin{cases}0 & [m\neq n]\\ \sqrt{\pi}2^n n! & [m=n]\end{cases}$$
したがって，規格化の条件を満たすためには，
$$\frac{|N_n|^2}{\alpha}\sqrt{\pi}2^n n!=1\quad\Leftrightarrow\quad|N_n|^2=\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}2^n n!}=\frac{1}{\sqrt{\pi}2^n n!}\left(\frac{m\kappa}{\hbar^2}\right)^{1/4}$$
$$N_n=\left(\frac{\alpha}{\pi^{1/2}2^n n!}\right)^{1/2}$$
とすれば良い。

注意：エルミート多項式の定義には異なる流儀があり，
$$He_n(x)=(-1)^n\exp\left(\frac{x^2}{2}\right)\frac{d^n}{dx^n}\exp\left(-\frac{x^2}{2}\right)$$
で定義される $He_n(x)$ をエルミート多項式と呼ぶことがある。
$$H_n(x)=2^{n/2}He_n\left(\sqrt{2}x\right)$$
$$He_n(x)=2^{-n/2}H_n\left(\frac{x}{\sqrt{2}}\right)$$
の関係がある。

$He_0(x)=1$, $He_1=x$, $He_2(x)=x^2-1$, $He_3(x)=x^3-3x$, $He_4(x)=x^4-6x^2+3$, $He_5(x)=x^5-10x^3+15x$, $\cdots$

漸化式　$He_{n+1}(x)-xHe_n(x)+nHe_{n-1}(x)=0$

母関数　$\exp(tx-t^2/2)=\sum_{n=0}^{\infty} He_n(x)\frac{t^n}{n!}$

直交関係　$\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left(-\frac{x^2}{2}\right)He_n(x)He_m(x)dx=\begin{cases}0 & [m\neq n]\\ n!\sqrt{2\pi} & [m=n]\end{cases}$

などの関係がある。

［参考文献］

Weisstein, Eric W. "Herimite Polynomial." From MathWorld--A Wolfram Web Resource.
http://mathworld.wolfram.com/HermitePolynomial.html
（2007年7月18日参照）

森口繁一ほか, 「岩波数学公式 III 特殊関数」p. 92 (1960)