講義 Note by 日置善郎
2011 年 12 月 20 日版

調和振動子の量子力学的取扱い

一般の束縛状態と調和振動子

１次元の井戸型ポテンシャルの中での束縛状態は，そのシュレディンガー方程式を近似なしで容易に解くことができ，かつエネルギー固有値が離散的になるといった量子論特有の効果を味わうことのできる数少ない貴重な例ではあるが，他の様々な束縛状態の扱いに簡単に応用できる訳ではない．そこで，もう少し一般的な立場で１次元束縛問題を考えてみよう．

質量 m の粒子に働く外力のポテンシャルを $V(x)$ とし，粒子が $V(x)$ の極小点の周辺で運動しているとする．この粒子が従う時間に依存しないシュレディンガー方程式は

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}u(x) + V(x)u(x) = Eu(x) \tag{1}$$

である．もしも，この粒子の運動に対して何の制限・条件も付けないのなら，この方程式を，具体形の与えられていない一般の $V(x)$ の下で解くことは不可能である．しかしながら，粒子が極小点の近傍に留まるという条件を課せば，それだけで状況は大きく変わる．

式を少しでも簡単にするために，極小点が $x = 0$ となるよう横軸（x 軸）原点を選び直そう．すると，その近傍では $V(x)$ は

$$V(x) \simeq V(0) + V'(0)x + \frac{1}{2}V''(0)x^2$$

と展開できるが，この中では $x = 0$ が極小点という条件より $V'(0) = 0$（つまり右辺第２項 $= 0$）および $V''(0) > 0$ でなければならない．ここで，さらに縦軸についても $V(0) = 0$ となるように原点を調節し，同時に $V''(0) > 0$ が明白になるよう $V''(0) = m\omega^2$ と置こう：

$$V(x) \simeq \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \tag{2}$$

この結果，上記のシュレディンガー方程式は

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}u(x) + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 u(x) = Eu(x) \tag{3}$$

となる．

式（2）のようなポテンシャルが与える力 F はどのようなものだろうか．力とポテンシャルの関係に従えば

$$F = -\frac{d}{dx}V(x) = -m\omega^2 x \tag{4}$$

となるが，これは安定点からのずれ（x）に比例する復元力を表し，古典力学でフックの法則として知られているバネやゴムによる力と同じ形である．そして，この結果生じる運動は**調和振動子**という名で知られている．すなわち，どのような関数形のポテンシャルの下であろうと，それに従う粒子は安定点の近傍では調和振動子として記述できることになる．つまり，調和振動子という運動は，単にバネやゴムにつながれた粒子の運動のみならず，一般の束縛状態の記述に適用可能な極めて重要な運動形態なのである．

古典力学における調和振動子

古典力学においては，上記の調和振動子が従うのはニュートンの運動方程式

$$m\frac{d^2x}{dt^2} = -m\omega^2 x$$

であり，これは直ちに

$$x = A\sin(\omega t + \theta_0)$$

（A，θ_0 は定数）と解けてしまう.[♯1] 更に，この x を時間微分して速度 v，加速度 a も難なく求められる．

シュレディンガー方程式の解法

これに対して，この運動を量子力学的に扱おうとすると途端に手強くなる．量子力学的調和振動子（の波動関数）が従う方程式は上記（3）のシュレディンガー方程式だが，これが同じ量子力学の井戸型ポテンシャル問題のように簡単には解けないのである．急がず焦らず一歩一歩理解を深めていこう．

まずは，方程式の見掛けをスッキリさせるため $\alpha \equiv \sqrt{m\omega/\hbar}$，$z \equiv \sqrt{m\omega/\hbar}\,x$，$\lambda \equiv 2E/(\hbar\omega)$ と置き換えて

$$\Big(\frac{d^2}{dz^2} + \lambda - z^2\Big)\chi(z) = 0 \tag{5}$$

[♯1] ここで ω は角振動数であり，振動の周期 T および振動数 ν とはそれぞれ $T = 2\pi/\omega$ 及び $\nu = 1/T = \omega/(2\pi)$ という関係にある．実は，先に m を抜き出す形で $V''(0) = m\omega^2$ と置いたのは，解がこのような形になることを見越してのことだった．

と書き直す．但し，ここで $u(z/\alpha)$ を $\chi(z)$ と表した．これで見た目はかなり簡単そうになったが，残念ながら解き方まで楽にはならない．

そこで，はじめに，この方程式の解の一般的性質を見ておこう．z を $-z$ で置き換えてみても $\chi(z) \to \chi(-z)$ 以外は不変なので，$\chi(-z)$ は $\chi(z)$ と同じ方程式を満たすことがわかる．これから $\chi(z)$ は偶関数あるいは奇関数のどちらかである ことが結論できる．[♯2]

次に微分方程式解法の定石に従い，$z \to +\infty$ における解の漸近的な振る舞いを調べてみる．そのような領域では，定数 λ は z^2 項に比べて無視できるので，この方程式は

$$\frac{d^2}{dz^2}\chi(z) = z^2\chi(z)$$

となり，n を任意の自然数として

$$\chi(z) \simeq z^n e^{\pm z^2/2}$$

という漸近的な解を持つ．実際，これを 2 回微分し，最も次数の高い項（z^{n+2} 項）のみ残せば $z^2\chi(z)$ が残り，上記方程式の右辺に一致する．

この漸近解の情報に基づけば，正確な解は $[\, z$ の多項式 $\times\, e^{\pm z^2/2}\,]$ という形になると予想される．但し，$e^{+z^2/2}$ 項は $z \to \infty$ で発散してしまうので物理的に意味のある解にはならない．そこで，この多項式を $F(z)$ として

$$\chi(z) = F(z)e^{-z^2/2} \tag{6}$$

と置き，$F(z)$ が満たすべき方程式を求めよう．上式を（5）式に代入すると

$$\Big(\frac{d^2}{dz^2} - 2z\frac{d}{dz} + \lambda - 1\Big)F(z) = 0 \tag{7}$$

という微分方程式が得られる．上で述べた理由により，$F(z)$ も z の偶関数か奇関数のどちらかなので，$F(z)$ の中の最低次の項を z^s とすれば

$$F(z) = a_0 z^s + a_1 z^{s+2} + a_2 z^{s+4} + \cdots = z^s \sum_{k=0} a_k z^{2k} \tag{8}$$

と書ける．但し，最低次の項が z^s と約束したので，係数 a_k のうち少なくとも a_0 は 0 ではない．また，s が偶数か奇数かで $F(z)$ が偶関数か奇関数かが決まる．

[♯2] 1次元の束縛問題では，ポテンシャルが偶関数であれば，解の波動関数（$\hat{H}$ の固有関数）は必ず偶関数か奇関数のどちらかになる（その証明は，例えば「量子力学」（日置著，吉岡書店）付録４を参照）．

これを上の $F(z)$ の満たすべき微分方程式に代入しよう．まず，２階微分項は

$$\begin{aligned}\frac{d^2}{dz^2}\sum_{k=0} a_k z^{2k+s} &= \sum_{k=0} a_k(2k+s)(2k+s-1)z^{2k+s-2} \\ &= a_0 s(s-1)z^{s-2} + a_1(s+2)(s+1)z^s \\ &\quad + \sum_{k=2} a_k(2k+s)(2k+s-1)z^{2k+s-2}\end{aligned}$$

となるが，右辺第３項（$\sum$ の項）で $k-1$ を改めて k と置けば，この新しい k は $1,\ 2,\ 3,\ \cdots$ という値をとるので

$$第３項 = \sum_{k=1} a_{k+1}(2k+s+2)(2k+s+1)z^{2k+s}$$

と書き直される．次に，１階微分の項は

$$\begin{aligned}-2z\frac{d}{dz}\sum_{k=0} a_k z^{2k+s} &= -2\sum_{k=0} a_k(2k+s)z^{2k+s} \\ &= -2sa_0 z^s - 2\sum_{k=1} a_k(2k+s)z^{2k+s}\end{aligned}$$

となるので, (7) 式は

$$\begin{aligned}&s(s-1)a_0 z^{s-2} + [\,(s+2)(s+1)a_1 + (\lambda-1-2s)a_0\,]z^s \\ &+\sum_{k=1}[\,(2k+s+2)(2k+s+1)a_{k+1} + (\lambda-1-4k-2s)a_k\,]z^{2k+s} = 0\end{aligned}$$

となる．今ここで我々が求めているのは「微分方程式の解」だから，この等式は（“特定の” ではなく）任意の z に対して成立する必要がある．このためにはそれぞれの z^m 項（$m = s-2,\ s,\ s+2, \cdots$）の係数が全て 0 にならなければならない：

$$\begin{aligned}&s(s-1)a_0 = 0 \\ &(s+2)(s+1)a_1 + (\lambda-1-2s)a_0 = 0 \\ &\quad\cdots\cdots\cdots\cdots \\ &(2k+s+2)(2k+s+1)a_{k+1} + (\lambda-1-4k-2s)a_k = 0 \\ &\quad\cdots\cdots\cdots\cdots\end{aligned}$$

まず，$a_0 \neq 0$ だったから第１の等式より

$$s=0 \quad または \quad s=1$$

となる．前述のように，$F(z)$ は $s=0$ なら偶関数，$s=1$ なら奇関数となる．次に，第2式以降は

$$
\begin{aligned}
&a_1 = -(\lambda-1-2s)a_0/[\,(s+2)(s+1)\,] \\
&\quad \cdots\cdots\cdots\cdots \\
&a_{k+1} = -(\lambda-1-4k-2s)a_k/[\,(2k+s+2)(2k+s+1)\,] \\
&\quad \cdots\cdots\cdots\cdots
\end{aligned} \tag{9}
$$

と書き直せるので，結局 a_0 を用いて a_1 が決まり，その a_1 を用いて a_2 が決まり … というように全ての係数が確定する．従って，これで $F(z)$ も求まることになる．

ここで，もし任意の k に対して上式右辺の a_k の前の因子（$=\lambda-1-4k-2s$）$\neq 0$ であるなら，それから決まる左辺の a_{k+1} も $a_k=0$ でない限り 0 以外の値を持つことになり（8）は無限級数となる．そこで，その場合の無限級数の性質を調べてみよう．この級数において隣接する 2 項の係数の比は

$$a_{k+1}/a_k = -(\lambda-1-4k-2s)/[\,(2k+s+2)(2k+s+1)\,]$$

であるから $k\to+\infty$ で

$$a_{k+1}/a_k \quad\to\quad 1/k$$

となるが，これは

$$e^{z^2} = 1 + z^2 + z^4/2! + \cdots + z^{2k}/k! + \cdots$$

における z^{2k+2} 項と z^{2k} 項の係数比 $1/(k+1)$ と（k が十分大きくなれば）同じである．従って，$|z|$ が大きい領域ほど高いベキの項の寄与が大きくなることを考えれば，<u>（8）式が無限級数になった場合には e^{z^2} と漸近的に同じ振舞いをする</u> ことがわかる．すると，$|z|\to+\infty$ において χ は

$$\chi(z) = F(z)e^{-z^2/2} \to e^{z^2}e^{-z^2/2} \to +\infty$$

と発散することになる．これは（数学的にはともかく）物理的には意味のない解である．

従って，この級数の 0 でない係数 a_k はある整数 $k=\ell\,(\geq 0)$ で終わり，それから先の係数 $a_{\ell+1}$，$a_{\ell+2}$，$\cdots$ は全て 0 にならなければならない．このためには各係数を決める（9）式の中で，a_ℓ に掛かる因子 $\lambda-1-4\ell-2s$ が 0 になることが必要である：

$$\lambda-1-4\ell-2s=0 \quad\Longrightarrow\quad \lambda = 1+4\ell+2s$$

λ はエネルギーを決める定数だったから，このことはエネルギー E の値が特別なものに限られてしまうことを意味する．すなわち，$n \equiv 2\ell + s$ と置いて

$$E\,(=E_n) = \Big(n + \frac{1}{2}\Big)\hbar\omega \tag{10}$$

である．n は，その定義から明らかなように，0 または正の整数であり，偶数が $s=0$，奇数が $s=1$ にそれぞれ対応する．$n=0$ は基底状態であり，そのときのエネルギー

$$E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$$

は不確定性原理によって理解される零点エネルギーである．これで全ての 0 でない係数 a_k も a_0 を用いて表され，その a_0 は波動関数の規格化によって決まる．また，n が与えられたときの F（これを F_n と記す）を決める方程式は

$$\Big(\frac{d^2}{dz^2} - 2z\frac{d}{dz} + 2n\Big)F_n(z) = 0 \tag{11}$$

となる．この微分方程式の形からわかるように，$F_n(z)$ には全体に掛かる定数分の不定性があるが，それを利用して最高次の項（F_n なら z^n）の係数が 2^n になるように調整されたものは**エルミートの多項式**と呼ばれ H_n と表される．

具体的に，小さい n に対しての $F_n(z)$ を幾つか求めてみよう．$n=0$ 及び $n=1$ の場合はそれぞれ $s=0$ $(\ell=0,\ \lambda=1)$ 及び $s=1$ $(\ell=0,\ \lambda=3)$ であって，この場合にはそれぞれ

$$F_0(z) = a_0, \qquad F_1(z) = a_0 z \tag{12}$$

となることはほぼ明らかだろう．次に，$n=2$ 及び $n=3$ は $s=0$ $(\ell=1,\ \lambda=5)$ と $s=1$ $(\ell=1,\ \lambda=7)$ に対応し，

$$F_2(z) = a_0(1-2z^2), \qquad F_3(z) = a_0 z(1-2z^2/3) \tag{13}$$

を得る．従って，上の定義に基づいて $H_{0,1,2,3}$ は

$$H_0(z)=1, \quad H_1(z)=2z, \quad H_2(z)=4z^2-2, \quad H_3(z)=8z^3-12z \tag{14}$$

となる．また，指数関数部分も含めた全体の波動関数 u_n の規格化に際しては

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx\, e^{-a^2x^2} = \sqrt{\pi}/a$$
$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx\, x^{2n} e^{-a^2x^2} = (2n-1)!!\,\sqrt{\pi}/(2^n a^{2n+1})$$

（$a>0$）という積分公式が役立つ．

生成消滅演算子による解法

前節末で，実際に幾つかの級数の係数を決めてみたが，n が大きくなると，それをコンパクトな式にまとめるのは簡単ではない．そこで，生成演算子・消滅演算子と呼ばれる二つの演算子を用いた別の解法を示そう．まず，演算子 $\hat{a}$ を

$$\hat{a} \equiv \frac{\alpha}{\sqrt{2}}\Big(x + \frac{i}{m\omega}\hat{p}\Big) \tag{15}$$

と定義する.[♯3] すると，そのエルミート共役 $\hat{a}^\dagger$ は $\hat{p}^\dagger = \hat{p}$ より

$$\hat{a}^\dagger = \frac{\alpha}{\sqrt{2}}\Big(x - \frac{i}{m\omega}\hat{p}\Big) \tag{16}$$

となり，これらは，$[\,x,\,\hat{p}\,] = i\hbar,\ \ [\,x,\,x\,] = [\,\hat{p},\,\hat{p}\,] = 0$ から容易に導かれるように

$$[\,\hat{a},\,\hat{a}^\dagger\,] = 1, \ \ [\,\hat{a},\,\hat{a}\,] = [\,\hat{a}^\dagger,\,\hat{a}^\dagger\,] = 0 \tag{17}$$

という交換関係を満たす．このように導入した $\hat{a}^\dagger$，$\hat{a}$ がそれぞれ上述の**生成演算子**および**消滅演算子**であり，両者はまとめて**生成消滅演算子**とも呼ばれる（この名称が何を意味するかは以下で明らかになる）．

これらの演算子を用いるとハミルトニアン $\hat{H}$ は

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2 = \hbar\omega\Big(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2}\Big)$$

と表されるので，時間に依存しないシュレディンガー方程式 $\hat{H}u = Eu$ は

$$\hbar\omega\Big(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2}\Big)u(x) = Eu(x)$$

となり，従って，これを解くことは，$\hat{a}^\dagger\hat{a}$ の固有値・固有関数を求める問題

$$\hat{a}^\dagger\hat{a}\,u_n(x) = \epsilon_n u_n(x)$$

（$n = 1, 2, \cdots$）に帰着される．ここで，$\hat{a}^\dagger\hat{a}$ はエルミート演算子だから固有値 ϵ_n は実数である．また，固有関数（波動関数）u_n は 1 に規格化されているものとする．この式の両辺に左から u_n^* を掛けて積分しよう：

$$\int dx\ u_n^*(x)\hat{a}^\dagger\hat{a}\,u_n(x) = \epsilon_n\int dx\ u_n^*(x)u_n(x)$$

♯3 α は（5）式を与える際に導入した定数（$\alpha \equiv \sqrt{m\omega/\hbar}$）．

上述のように u_n は規格化された関数であるから右辺は ϵ_n となり，また左辺はエルミート共役の定義より

$$
\begin{aligned}
&\int dx\, u_n^*(x)\hat{a}^\dagger\hat{a}\, u_n(x) \\
&\qquad = \Big[\int dx\, [\hat{a}\, u_n(x)]^* (\hat{a}^\dagger)^\dagger\, u_n(x) \Big]^* = \Big[\int dx\, |\hat{a}\, u_n(x)|^2 \Big]^* = \int dx\, |\hat{a}\, u_n(x)|^2 \geq 0
\end{aligned}
$$

となるので固有値 ϵ_n は負の値はとり得ないことがわかる．

次に，生成消滅演算子の機能について調べてみよう．交換関係（17）を用いれば

$$
\hat{a}^\dagger\hat{a}\,[\hat{a}u_n(x)] = (\hat{a}\hat{a}^\dagger - 1)\hat{a}u_n(x) = \hat{a}(\hat{a}^\dagger\hat{a} - 1)u_n(x) = (\epsilon_n - 1)\hat{a}u_n(x) \tag{18}
$$

$$
\hat{a}^\dagger\hat{a}\,[\hat{a}^\dagger u_n(x)] = \hat{a}^\dagger\,[\hat{a}\hat{a}^\dagger u_n(x)] = \hat{a}^\dagger(\hat{a}^\dagger\hat{a} + 1)u_n(x) = (\epsilon_n + 1)\hat{a}^\dagger u_n(x) \tag{19}
$$

という関係が得られる．これからわかるように，$\hat{a}$ は u_n に作用して固有値が 1 だけ小さい固有関数を生み出す能力を，また $\hat{a}^\dagger$ は固有値が 1 だけ大きい固有関数を生み出す能力をそれぞれ持っている．従って，$\hat{a}$ を u_n に連続して作用させていくと，その固有値が $\epsilon_n - 1$，$\epsilon_n - 2$，$\cdots$ であるような固有関数が生まれるが，全ての固有値は正または 0 であるから，最後には最小の固有値 ϵ_0 をもつ関数 $u_0(\neq 0)$ に達する．そこで，更にこの u_0 に $\hat{a}$ を作用させたらどうなるだろうか．もしも $\hat{a}u_0 \neq 0$ であるとすると，この関数 $\hat{a}u_0$ は（18）式の計算に従い固有値が $\epsilon_0 - 1$ ということになり "最小固有値 ϵ_0 よりも小さい固有値が存在する" という論理矛盾が生じる．従って，

$$
\hat{a}u_0(x) = 0 \tag{20}
$$

でなければならない．この式の両辺に左から複素共役 $(\hat{a}u_0)^*$（勿論これも 0）を掛けて積分すると，エルミート共役の定義も用いて

$$
\begin{aligned}
\int dx\, [\,\hat{a}u_0(x)\,]^*\hat{a}u_0(x) = \Big[\int dx\, [\,\hat{a}u_0(x)\,]^*\hat{a}u_0(x) \Big]^* = \int dx\, u_0^*(x)\, \underbrace{\hat{a}^\dagger\hat{a}u_0(x)}_{\epsilon_0 u_0(x)} \\
= \epsilon_0 \int dx\, |u_0(x)|^2 = 0
\end{aligned}
$$

となるが，$u_0(x) \neq 0$ だったから，結局，最小固有値 ϵ_0 は 0 ということになる．しかも，任意の固有値 (ϵ_n) から 1 ずつ引くことによって $\epsilon_0(=0)$ に到達したのだから，全ての固有値は 0 または正の整数という結論を得る．つまり，ハミルトニアン $\hat{H}$ の固有値は

$$
E_n = \hbar\omega\Big(n + \frac{1}{2}\Big)
$$

ということがわかる．また，ここで改めて $a^\dagger$，a の働きを思い出せば，これらは状態のエネルギーを $\hbar\omega$ ずつ増減させることがわかる．これを量子論的に表現すれば，$\hbar\omega$ というエネルギーの量子が１個増えたり減ったりするということで，生成・消滅演算子という名称もここに由来する.[♯4] また，$a^\dagger a$ は，その固有値がこの量子の数を表すことになるので，**個数演算子**と呼ばれる．

さて，次に波動関数を具体的に計算していこう．消滅演算子 a の定義（16）を思い出せば，式（20）は u_0 を決める微分方程式でもあることが理解できる：

$$\Big(x+\frac{i}{m\omega}\hat{p}\Big)u_0(x)=\Big(x+\frac{1}{\alpha^2}\frac{d}{dx}\Big)u_0(x)=0$$

これを

$$\frac{1}{u_0(x)}\frac{d}{dx}u_0(x)=-\alpha^2 x$$

と書き直せば両辺の積分が直ちに実行でき，

$$u_0(x)=C_0 e^{-\alpha^2x^2/2}$$

という解に達する．但し，C_0 は積分定数に対応する任意定数であり，u_0 の規格化を通じて決められる．前出の積分公式を用いれば

$$\int_{-\infty}^{+\infty}dx\, e^{-\alpha^2x^2}=\sqrt{\pi}/\alpha$$

なので，$|C_0|=(\alpha/\sqrt{\pi})^{1/2}$ である．これでは C_0 の絶対値しか決まったことにならないが，実験・観測結果との関係において波動関数が意味を持つのはその絶対値なので，これは C_0 そのものと見なしても構わない：

$$u_0(x)=\Big(\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}\Big)^{1/2}e^{-\alpha^2x^2/2} \tag{21}$$

これに生成演算子 $\hat{a}^\dagger$ を作用させていけば一般の波動関数 u_n も得られることになるが，そのためには，規格化も考慮した u_{n+1} と $\hat{a}^\dagger u_n$ の関係が必要になる．つまり，両者はどちらも同じ固有値を持つ $\hat{a}^\dagger\hat{a}$ の固有関数であるので，互いに独立ではなく[♯5]

$$u_{n+1}(x)=C_n\hat{a}^\dagger u_n(x)$$

[♯4] $a^\dagger$ と a は，状態のエネルギー準位をそれぞれ一つ上げ下げするという意味で，$a^\dagger$ を**上昇演算子**，a を**下降演算子**，両者まとめて**昇降演算子**と呼ぶ文献もある．

[♯5] １次元束縛状態には縮退はない，つまり同じ固有値に属する固有関数は一つだけ存在するということに依る（この証明も前述の「量子力学」付録４参照）．

という関係にあるはずで，この比例定数 C_n を決めなければならない．ここで再び両辺の複素共役との積を積分する（上記と同じ理由により C_n は実数として扱う）:

$$\int dx\, u_{n+1}^*(x)u_{n+1}(x) = C_n^2 \int dx\, [\, \hat{a}^\dagger u_n(x)\,]^* \hat{a}^\dagger u_n(x)$$

ここで，u_{n+1} は規格化された波動関数だから左辺は1，また右辺はエルミート共役の定義に従って

$$\text{右辺} = C_n^2 \Big[\int dx\, u_n^*(x)(\hat{a}^\dagger)^\dagger \hat{a}^\dagger u_n(x)\,\Big]^* = C_n^2 \Big[\int dx\, u_n^*(x)\hat{a}\hat{a}^\dagger u_n(x)\,\Big]^*$$

交換関係より $\hat{a}\hat{a}^\dagger = \hat{a}^\dagger\hat{a} + 1$ だから

$$\text{右辺} = C_n^2 \Big[\int dx\, u_n^*(x)\,\underbrace{(\hat{a}^\dagger\hat{a}+1)u_n(x)}_{(n+1)u_n(x)}\,\Big]^* = C_n^2(n+1)\Big[\int dx\, u_n^*(x)u_n(x)\,\Big]^* = C_n^2(n+1)$$

従って，$C_n = 1/\sqrt{n+1}$，すなわち

$$u_{n+1}(x) = \hat{a}^\dagger u_n(x)/\sqrt{n+1} \tag{22}$$

を得る．ここで用いた n は負ではない任意の整数だから

$$u_n(x) = \frac{1}{\sqrt{n}}\hat{a}^\dagger u_{n-1}(x) = \frac{1}{\sqrt{n(n-1)}}(\hat{a}^\dagger)^2 u_{n-2}(x) = \cdots = \frac{1}{\sqrt{n!}}(\hat{a}^\dagger)^n u_0(x)$$

となる．

最後の作業は $(\hat{a}^\dagger)^n u_0(x)$ の計算である．任意の微分可能な関数 $f(x)$ に対して成り立つ等式

$$\hat{a}^\dagger f(x) = -\frac{1}{\sqrt{2}\alpha}\Big(\frac{d}{dx} - \alpha^2 x\Big)f(x) = -\frac{1}{\sqrt{2}\alpha}e^{\alpha^2x^2/2}\frac{d}{dx}[\, e^{-\alpha^2x^2/2}f(x)\,]$$

を用いると♯6

$$\begin{aligned} u_n(x) &= \frac{1}{\sqrt{n!}}(\hat{a}^\dagger)^n u_0(x) = \frac{1}{\sqrt{n!}}\frac{-1}{\sqrt{2}\alpha}(\hat{a}^\dagger)^{n-1}\Big[\, e^{\alpha^2x^2/2}\frac{d}{dx}[\, e^{-\alpha^2x^2/2}u_0(x)\,]\Big] \\ &= \frac{C_0}{\sqrt{n!}}(\hat{a}^\dagger)^{n-1}\frac{-1}{\sqrt{2}\alpha}e^{\alpha^2x^2/2}\frac{d}{dx}e^{-\alpha^2x^2} \\ &= \frac{C_0}{\sqrt{n!}}(\hat{a}^\dagger)^{n-2}\frac{-1}{\sqrt{2}\alpha}\hat{a}^\dagger\Big[\, e^{\alpha^2x^2/2}\frac{d}{dx}e^{-\alpha^2x^2}\,\Big] \end{aligned}$$

（ここで上記公式を再度使って）

♯6 このあたりの計算に関しては「量子力学」（原康夫，岩波書店）を大いに参考にさせて頂いた．

$$
\begin{aligned}
&= \frac{C_0}{\sqrt{n!}}(\hat{a}^\dagger)^{n-2}\Big(\frac{-1}{\sqrt{2}\alpha}\Big)^2 e^{\alpha^2x^2/2}\frac{d}{dx}\Big[\, e^{-\alpha^2x^2/2}e^{\alpha^2x^2/2}\frac{d}{dx}e^{-\alpha^2x^2}\ \Big]\\
&= \frac{C_0}{\sqrt{n!}}(\hat{a}^\dagger)^{n-2}\Big(\frac{-1}{\sqrt{2}\alpha}\Big)^2 e^{\alpha^2x^2/2}\frac{d^2}{dx^2}e^{-\alpha^2x^2}
\end{aligned}
$$

（この計算を$\hat{a}^\dagger$がなくなるまで繰り返し）

$$
\begin{aligned}
&= \frac{C_0}{\sqrt{n!}}\Big(\frac{-1}{\sqrt{2}\alpha}\Big)^n e^{\alpha^2x^2/2}\frac{d^n}{dx^n}e^{-\alpha^2x^2}\\
&= \Big(\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}2^n n!}\Big)^{1/2}(-1)^n e^{\alpha^2x^2}\Big[\,\frac{d^n}{d(\alpha x)^n}e^{-\alpha^2x^2}\ \Big]e^{-\alpha^2x^2/2}
\end{aligned}
$$

となる．実は，エルミートの多項式は

$$
H_n(x) = (-1)^n e^{x^2}\frac{d^n}{dx^n}e^{-x^2} \tag{23}
$$

と表すことができ,[♯7] この形を用いて

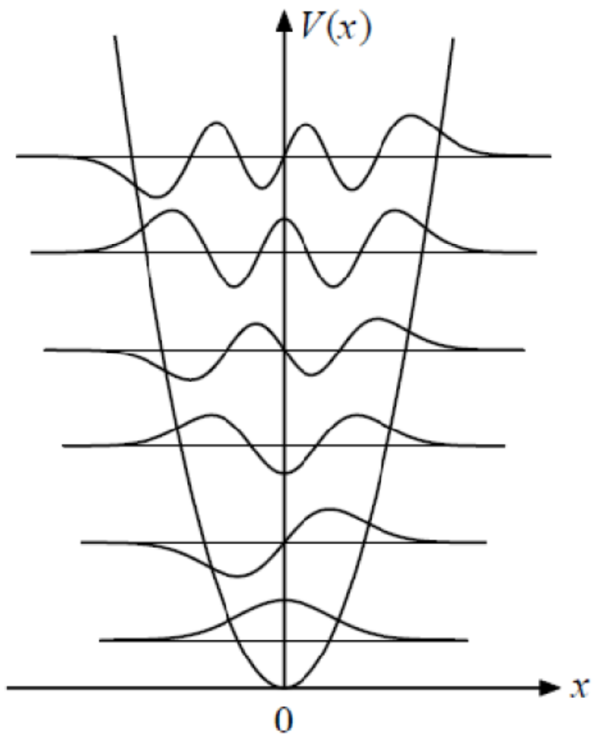
$$
u_n(x) = \Big(\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}2^n n!}\Big)^{1/2} H_n(\alpha x)e^{-\alpha^2x^2/2} \tag{24}
$$

と表される．このようにして量子力学的調和振動子の波動関数とエネルギー固有値が完全に決定された．参考までに，$n = 1, \cdots, 6$ に対応する波動関数の振舞いを次頁の図に示す．

[♯7] これは，一見したところ指数関数のようでもあるが，全ての微分が完了したあと二つの指数関数は掛け合わされて１になるので，確かに多項式である．実際，微分を実行すれば

$$
H_0(x) = 1,\quad H_1(x) = 2x,\quad H_2(x) = 4x^2 - 2,\ \cdots
$$

となり，確かに級数で求めた形（14）に一致する．



下から順に $n = 1,2,\ldots 6$ の固有状態を表す波動関数

http://www.th.phys.titech.ac.jp/~muto/lectures/QMI08/QMI08_chap07.pdf　より