4-2 一般の波動関数（調和振動子）

波動関数（調和振動子）

⇒ 量子数 $\underline{\underline{n}}$ で決まる

$$
\begin{cases}
E_{\underline{\underline{n}}} = \hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right) \quad (n=0,1,2,\cdots) \\
u_{\underline{\underline{n}}}(x) = N_n H_n(\alpha x)\, e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 x^2}
\end{cases}
$$

$$
\alpha = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}, \quad N_n = \left(\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}\, 2^n n!}\right)^{\frac{1}{2}}
$$

（規格化定数）

- 完全規格直交系：　$u_n(x)$ は完全規格直交系をなす

$$
\begin{cases}
\displaystyle\int_{-\infty}^{\infty} u_n^*(x)\, u_m(x)\, dx = \delta_{mn} \\
\displaystyle\sum_{n=0}^{\infty} u_n(x)\, u_n^*(y) = \delta(x-y)
\end{cases}
$$

- $H_n(\xi)$ ：　エルミート多項式という

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

【母関数】

$H_n(\xi)$ は次の母関数により表わされる。

$$\boxed{e^{-x^2+2\xi x} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} H_n(\xi)\, x^n}$$

母関数という　　　　エルミート多項式

この時

$$\boxed{H_n(\xi) = (-)^n e^{\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2}}$$

とかける

(証)

$$e^{-x^2+2\xi x} = e^{-(x-\xi)^2}\, e^{\xi^2}$$

ここで $f(x) \equiv e^{-(x-\xi)^2}$ と定義する

x についてテーラー展開する

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

但し

$$f^{(n)}(x) = \frac{d^n}{dx^n} e^{-(x-\xi)^2}$$

$$= (-)^n \frac{d^n}{d\xi^n} e^{-(x-\xi)^2}$$

(微分の入れかえ)

よって

$$f^{(n)}(0) = (-)^n \frac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2}$$

となる

($x=0$ より)

よって
$$e^{-(x-\xi)^2} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!}\left((-)^n \frac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2} \right) x^n$$

また $e^{-x^2+2\xi x} = e^{\xi^2} e^{-(x-\xi)^2}$ より

$$e^{-x^2+2\xi x} = e^{\xi^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!}\left((-)^n \frac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2} \right) x^n$$

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

これより
$$\boxed{H_n(\xi) = (-)^n e^{\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2}}$$

と求まった。 //

ところで この式 より

$$\begin{cases} H_n'(\xi) = 2n\, H_{n-1}(\xi) & (1) \\ H_{n+1}(\xi) = 2\xi H_n(\xi) - 2n\, H_{n-1}(\xi) & (2) \end{cases}$$

が導かれる

(1) $H_n'(\xi) = 2n H_{n-1}(\xi)$ の証明

$$e^{-x^2+2\xi x} = \sum \frac{1}{n!} H_n(\xi) x^n$$

この両辺をξで微分

$$\underline{2x\, e^{-x^2+2\xi x} = \sum \frac{1}{n!} H_n'(\xi) x^n}$$

この時

$$\text{左辺} = 2x\, e^{-x^2+2\xi x}$$
$$= \sum_n \frac{2}{n!} H_n(\xi) x^{n+1}$$

ここで $n+1 \to n$ と変換すると

$$\text{左辺} = \sum \frac{2}{(n-1)!} H_{n-1}(\xi) x^n$$
$$= \sum \frac{1}{n!} \left[2n H_{n-1}(\xi) \right] x^n$$

よって

$$\boxed{H_n'(\xi) = 2n H_{n-1}(\xi)}$$

が示された//

(2) $H_{n+1}(\xi) = 2\xi H_n(\xi) - 2n H_{n-1}(\xi)$ の証明

$$H_n(\xi) = (-)^n e^{\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2}$$

をξで微分

$$\therefore \quad H_n'(\xi) = (-)^n \left[2\xi e^{\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2} + e^{\xi^2} \frac{d^{n+1}}{d\xi^{n+1}} e^{-\xi^2} \right]$$

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

一方 $H_n'(\xi) = 2n H_{n-1}(\xi)$ より

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

これを整理して

$$\underline{H_{n+1}(\xi) + 2n H_{n-1}(\xi) - 2\xi H_n(\xi) = 0}$$

が示された。//