一次元調和振動子の固有状態（微分方程式偏）

(1) ハミルトニアン

ポテンシャルは$V(x)=\frac{1}{2}m\omega^2x^2$となる（補遺集5参照）ので、ハミルトニアンは

$$H=\frac{p^2}{2m}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2$$

シュレディンガー方程式は

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\varphi(x)+\frac{1}{2}m\omega^2x^2\varphi(x)=E\varphi(x)$$

となる。そこで、$E=\frac{1}{2}\hbar\omega\lambda$とおくと

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\varphi(x)+\frac{1}{2}m\omega^2x^2\varphi(x)=\frac{1}{2}\hbar\omega\lambda\varphi(x)$$
$$-\frac{\hbar}{m\omega}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\varphi(x)+\frac{m\omega}{\hbar}x^2\varphi(x)=\lambda\varphi(x)$$
$$-\frac{\partial^2}{\partial\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\right)^2}\varphi(x)+\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\right)^2\varphi(x)=\lambda\varphi(x)$$

であるから$\xi=\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x$とおくと、解くべき方程式は

$$-\frac{\partial^2}{\partial\xi^2}\varphi(\xi)+\xi^2\varphi(\xi)=\lambda\varphi(\xi)$$
$$\frac{\partial^2}{\partial\xi^2}\varphi(\xi)+\left(\lambda-\xi^2\right)\varphi(\xi)=0$$

となる。

(2) 方程式の解

まず、$\xi\to\pm\infty$での方程式の近似解を求めることを考えよう。ξがλを無視できるくらい大きいとすると

$$\frac{\partial^2}{\partial\xi^2}\varphi(\xi)-\xi^2\varphi(\xi)=0$$

これは第二項がξの関数になっているので補遺集3の方法では解くことができないが、同

様の形をした関数が解になっている可能性が高い。そこで $\varphi(\xi)=\mathrm{e}^{a\xi^2}$ とおくと、

$$\frac{\partial}{\partial\xi}\left(\mathrm{e}^{a\xi^2}\right)=2a\xi\,\mathrm{e}^{a\xi^2},\quad \frac{\partial^2}{\partial\xi^2}\left(\mathrm{e}^{a\xi^2}\right)=\frac{\partial}{\partial\xi}\left(2a\xi\,\mathrm{e}^{a\xi^2}\right)=2a\mathrm{e}^{a\xi^2}+4a^2\xi^2\,\mathrm{e}^{a\xi^2}$$

であるから、これを近似した方程式に代入すると

$$\frac{\partial^2}{\partial\xi^2}\left(\mathrm{e}^{a\xi^2}\right)-\xi^2\left(\mathrm{e}^{a\xi^2}\right)=2a\mathrm{e}^{a\xi^2}+4a^2\xi^2\,\mathrm{e}^{a\xi^2}-\xi^2\,\mathrm{e}^{a\xi^2}=\mathrm{e}^{a\xi^2}\left(2a+\xi^2\left(4a^2-1\right)\right)=0$$

より

$$2a+\xi^2\left(4a^2-1\right)=0$$

ξ が $2a$ を無視できるくらい大きいとすると

$$\xi^2\left(4a^2-1\right)=0\Rightarrow 4a^2-1\Rightarrow a=\pm\frac{1}{2}$$

すなわち、$\varphi(\xi)=\mathrm{e}^{\frac{1}{2}\xi^2}$ と $\varphi(\xi)=\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\xi^2}$ が $\xi\to\pm\infty$ での方程式の近似解の候補になる。ところが満たすべき境界条件は $\varphi(\pm\infty)\to 0$ であり、$\lim_{\xi\to\pm\infty}\mathrm{e}^{\frac{1}{2}\xi^2}=\infty,\ \lim_{\xi\to\pm\infty}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\xi^2}=0$ であることから、境界条件を満たすの近似解の候補は $\varphi(\xi)=\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}}$ である。ためしにこの解をもとの方程式に代入してみると

$$\begin{aligned}\frac{\partial^2}{\partial\xi^2}\left(\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\xi^2}\right)+\left(\lambda-\xi^2\right)\left(\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\xi^2}\right)&=\frac{\partial}{\partial\xi}\left(-\xi\,\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\xi^2}\right)+\left(\lambda-\xi^2\right)\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\xi^2}\\&=-\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\xi^2}+\xi^2\,\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\xi^2}+\lambda\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\xi^2}-\xi^2\,\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\xi^2}\\&=\left(\lambda-1\right)\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\xi^2}=0\end{aligned}$$

となりこれは $\lambda=1$ のとき解になっていることがわかる。

そこで $\varphi(\xi)=u(\xi)\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\xi^2}$ とおき、この形の解を求めよう。

$$\frac{\partial\varphi(\xi)}{\partial\xi}=\frac{\partial u(\xi)}{\partial\xi}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\xi^2}-u(\xi)\xi\,\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\xi^2}=\left(\frac{\partial u(\xi)}{\partial\xi}-\xi u(\xi)\right)\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\xi^2}$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial^2\varphi(\xi)}{\partial\xi^2}&=\frac{\partial^2 u(\xi)}{\partial\xi^2}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\xi^2}-\frac{\partial u(\xi)}{\partial\xi}\xi\,\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\xi^2}-\left(\frac{\partial u(\xi)}{\partial\xi}\xi\,\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\xi^2}+u(\xi)\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\xi^2}-u(\xi)\xi^2\,\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\xi^2}\right)\\&=\left(\frac{\partial^2 u(\xi)}{\partial\xi^2}-2\xi\frac{\partial u(\xi)}{\partial\xi}+\xi^2 u(\xi)-u(\xi)\right)\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\xi^2}\end{aligned}$$

であるから、これをもとの方程式に代入すると、

$$\frac{\partial^2}{\partial\xi^2}\left(u(\xi)\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\xi^2}\right)+\left(\lambda-\xi^2\right)\left(u(\xi)\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\xi^2}\right)=\left(\frac{\partial^2 u(\xi)}{\partial\xi^2}-2\xi\frac{\partial u(\xi)}{\partial\xi}+\xi^2 u(\xi)-u(\xi)\right)\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\xi^2}+\left(\lambda-\xi^2\right)u(\xi)\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\xi^2}$$
$$=\left(\frac{\partial^2 u(\xi)}{\partial\xi^2}-2\xi\frac{\partial u(\xi)}{\partial\xi}+\xi^2 u(\xi)+(\lambda-1)u(\xi)\right)\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\xi^2}=0$$

よって $u(\xi)$ に対する微分方程式は

$$\frac{\partial^2 u(\xi)}{\partial\xi^2}-2\xi\frac{\partial u(\xi)}{\partial\xi}+(\lambda-1)u(\xi)=0$$

である。この方程式を満たす $u(\xi)$ を多項式の形で求めてみよう。

$u(\xi)=\sum_{m=0} c_m\xi^m$ とおき、これを $u(\xi)$ に対する微分方程式に代入すると

$$\frac{\partial^2}{\partial\xi^2}\left(\sum_{m=0} c_m\xi^m\right)-2\xi\frac{\partial u(\xi)}{\partial\xi}\left(\sum_{m=0} c_m\xi^m\right)+(\lambda-1)\left(\sum_{m=0} c_m\xi^m\right)=0$$

微分と和は順序を入れ替えてもかまわないので

$$\sum_{m=0} c_m\frac{\partial^2}{\partial\xi^2}\xi^m-2\xi\sum_{m=0} c_m\frac{\partial}{\partial\xi}\xi^m+(\lambda-1)\sum_{m=0} c_m\xi^m=0$$
$$\sum_{m=2} m(m-1)c_m\xi^{m-2}-2\xi\sum_{m=1} mc_m\xi^{m-1}+(\lambda-1)\sum_{m=0} c_m\xi^m=0$$

第一項の m を $m+2$ でおきかえ、第二項は一般に 0 の和は総和を変化させない

すなわち $\sum_{m=1} mA_m=\sum_{m=0} mA_m$ であることをもちいると

$$\sum_{m=0}(m+2)(m+1)c_{m+2}\xi^m-2\sum_{m=0} mc_m\xi^m+(\lambda-1)\sum_{m=0} c_m\xi^m=0$$
$$\sum_{m=0}\left((m+2)(m+1)c_{m+2}+(\lambda-1-2m)c_m\right)\xi^m=0$$

これが任意の ξ について成立するためには

$$(m+2)(m+1)c_{m+2}+(\lambda-1-2m)c_m=0$$

すなわち、

$$c_{m+2}=\frac{2m+1-\lambda}{(m+2)(m+1)}c_m\qquad(m=0,1,2,3,\cdots)$$

でなければならない。

この式からc_0が決まれば次々に$c_2, c_4, c_6, c_8, \cdots$が決定し、$c_1$が決まれば次々に$c_3, c_5, c_7, c_9, \cdots$が決定する。この$c_0$と$c_1$が二つの積分定数に相当している。

さて、ここでどのような$m \ (m = 0,1,2,3,\cdots)$についても$\lambda \neq 2m+1$であると仮定しよう。すると$c_{m+2} = \dfrac{2m+1-\lambda}{(m+2)(m+1)} c_m \quad (m = 0,1,2,3,\cdots)$の分子は決して零にならないので$c_0$と$c_1$のどちらも零でないかぎり級数は無限に続くことになる。mが非常に大きいところではnに比べて定数の部分は無視できると考えられ、mが奇数のときと偶数のときにわけて考えると

$$c_m = c_{2k+1} = \frac{2(2k+1)-1-\lambda}{(2k+1)2k} c_{2k-1} \approx \frac{1}{k} c_{2k-1} \Rightarrow c_{2k+1} \approx \frac{1}{k!} c_1$$
$$c_m = c_{2k} = \frac{2(2k)-1-\lambda}{2k(2k-1)} c_{2k-2} \approx \frac{1}{k} c_{2k-2} \Rightarrow c_{2k+2} \approx \frac{1}{k!} c_0$$

となる。$u(\xi) = \sum_{m=0} c_m \xi^m$であるから$\xi$が非常に大きいところでは、主に$m$が非常に大きいところが全体の大きさを決めているので、

$$\begin{aligned} u(\xi) &= \sum_{m=0} c_n \xi^m = \sum_{k=0} c_{2k} \xi^{2k} + \sum_{k=0} c_{2k+1} \xi^{2k+1} \\ &\approx \sum_{k=0} \frac{1}{k!} c_0 \xi^{2k} + \sum_{k=0} \frac{1}{k!} c_1 \xi^{2k+1} = c_0 \sum_{k=0} \frac{1}{k!} \left(\xi^2\right)^k + c_1 \xi \sum_{k=0} \frac{1}{k!} \left(\xi^2\right)^k = (c_0 + c_1 \xi) \mathrm{e}^{\xi^2} \end{aligned}$$

より、非常に大きいξについては$u(\xi) \approx \mathrm{e}^{\xi^2}$。ところが$\varphi(\xi) = u(\xi) \mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\xi^2}$であるから$\varphi(\xi) = u(\xi) \mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\xi^2} \approx \mathrm{e}^{\xi^2} \mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\xi^2} = \mathrm{e}^{\frac{1}{2}\xi^2}$となり、$\xi$が非常に大きいところで$\varphi(\xi) = 0$にならない。したがって最初の仮定にもどって適当な$m$について$2m+1-\lambda = 0$が成立しなければならない。すなわち$\lambda = 2n+1 \quad (n = 0,1,2,3,\cdots)$でなければならない。もし、$\lambda = 2n+1 \quad (n = 0,1,2,3,\cdots)$であれば$c_{m+2} = \dfrac{2(m-n)}{(m+2)(m+1)} c_m$となり$m \leq n$にたいして$c_m \neq 0$であっても、$m > n$にたいしては$c_m = 0$となり、$u(\xi)$は有限項の多項式になるので$\varphi(\xi)$は「無限遠で零になる」という境界条件を満たす。ただし、たとえばnが偶数のとき$c_1 \neq 0$であれば奇数のmについては$m-n=0$になることはなく級数が無限に続いてしまうことになる。

そこで、nが偶数のとき$c_0 \neq 0, c_1 = 0$、nが奇数のとき$c_0 = 0, c_1 \neq 0$でなければならない。（$c_0 = 0, c_1 = 0$だと$u(\xi) = 0$となり、波動関数がいたるところで零になってしまう。）このことにより不定定数はc_0もしくはc_1の一つだけとなり、これは規格化条件により決定される。

解の具体的な形は

$n = 0$のとき$\lambda = 1$、

$$\left.\begin{array}{l} c_0 \neq 0 \\ c_2 = \dfrac{2(0-0)}{(0+2)(0+1)}c_0 = 0 \Rightarrow 0 = c_2 = c_4 = c_6 \cdots \\ 0 = c_1 = c_3 = c_5 \cdots \end{array}\right\} \Rightarrow u(\xi) = c_0, \quad \varphi(\xi) = c_0 \mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\xi^2}$$

$n = 1$のとき$\lambda = 3$、

$$\left.\begin{array}{l} 0 = c_0 = c_2 = c_4 \cdots \\ c_1 \neq 0 \\ c_3 = \dfrac{2(1-1)}{(1+2)(1+1)}c_1 = 0,\ 0 = c_5 = c_7 = c_9 \cdots \end{array}\right\} \Rightarrow u(\xi) = c_1\xi, \quad \varphi(\xi) = c_1\xi \mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\xi^2}$$

$n = 2$のとき$\lambda = 5$、

$$\left.\begin{array}{l} c_0 \neq 0,\ c_2 = -2c_0 \\ 0 = c_4 = c_6 = c_8 \cdots \\ 0 = c_1 = c_3 = c_5 \cdots \end{array}\right\} \Rightarrow u(\xi) = c_0 - 2c_0\xi^2, \quad \varphi(\xi) = c_0\left(1 - 2\xi^2\right)\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\xi^2}$$

$n = 3$のとき$\lambda = 7$、

$$\left.\begin{array}{l} 0 = c_0 = c_2 = c_4 \cdots \\ c_1 \neq 0,\ c_3 = -\dfrac{2}{3}c_1 \\ 0 = c_5 = c_7 = c_9 \cdots \end{array}\right\} \Rightarrow u(\xi) = c_1\xi - \frac{2}{3}c_1\xi^3, \quad \varphi(\xi) = c_1\left(\xi - \frac{2}{3}\xi^3\right)\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\xi^2}$$

のようになる。この関数はエルミートの多項式として知られる関数の定数倍になっている。