本節では，1 次元調和振動子モデルでハミルトニアンが書けるときの波動函数の表示を求める．波動函数とは，Schrödinger 方程式,

$$\hat{H}\left|\psi\right\rangle = E\left|\psi\right\rangle \tag{0.0.1}$$

を満たす $\left|\psi\right\rangle$ について，

$$\psi(x) \coloneqq \left\langle x \middle| \psi \right\rangle \tag{0.0.2}$$

となるように（一般化）座標 x へ射影したものである．**式** (0.0.1) に対して $\left\langle x\right|$ を左から書ければ，

$$\left\langle x \middle| \hat{H} \middle| \psi \right\rangle = E\psi(x) \tag{0.0.3}$$

となるのだから，左辺を計算して $\psi(x)$ に演算子がかかる形に変形すれば，波動函数を求めることができる．本ノートにおいて，$\hat{\cdot}$ を演算子として，その固有値を $\cdot$，固有ベクトル (固有函数) を $\left|\cdot\right\rangle$ と書く．

$$\hat{x}\left|x\right\rangle = x\left|x\right\rangle \tag{0.0.4}$$

$$\hat{p}\left|x\right\rangle = p\left|x\right\rangle \tag{0.0.5}$$

である．また，$\hat{x}$ や $\hat{p}$ は物理量であり，Hermite 演算子だからその固有ベクトルは，

$$\left\langle x' \middle| x \right\rangle = \delta(x'-x) \tag{0.0.6}$$

$$\left\langle p' \middle| p \right\rangle = \delta(p'-p) \tag{0.0.7}$$

と規格化してあり，

$$\int \mathrm{d}x \left|x\right\rangle\!\left\langle x\right| = \hat{1} \tag{0.0.8}$$

$$\int \mathrm{d}p \left|p\right\rangle\!\left\langle p\right| = \hat{1} \tag{0.0.9}$$

が成立する．なお，特に断らない限り積分範囲は $-\infty$ から ∞ である．

0.0.1 ハミルトニアン

古典的な 1 次元調和振動子のハミルトニアン H は，

$$H = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 + \frac{1}{2m}p^2 \tag{0.0.10}$$

である．ただし，質量を m，固有角周波数を ω，座標を x，運動量を p とした．x と p は正準共役な変数の組であるから，$x \to \hat{x}$，$p \to \hat{p}$ として，

$$\begin{aligned}
\hat{H} &= \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2 + \frac{1}{2m}\hat{p}^2 && (0.0.11)\\
&= \hbar\omega\left(\frac{m\omega}{2\hbar}\hat{x}^2 + \frac{1}{2m\hbar\omega}\hat{p}^2\right) && (0.0.12)\\
&= \hbar\omega\left[\left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x} - \mathrm{i}\sqrt{\frac{1}{2m\hbar\omega}}\hat{p}\right)\left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x} + \mathrm{i}\sqrt{\frac{1}{2m\hbar\omega}}\hat{p}\right) - \mathrm{i}\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\sqrt{\frac{1}{2m\hbar\omega}}[\hat{x},\hat{p}]\right] && (0.0.13)\\
&= \hbar\omega\left(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2}\right) && (0.0.14)
\end{aligned}$$

となる．ただし，

$$\hat{a} \coloneqq \left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x} + \mathrm{i}\sqrt{\frac{1}{2m\hbar\omega}}\hat{p}\right) \tag{0.0.15}$$

$$\hat{a}^\dagger \coloneqq \left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x} - \mathrm{i}\sqrt{\frac{1}{2m\hbar\omega}}\hat{p}\right) \tag{0.0.16}$$

と定義した．$\hat{a}$ と $\hat{a}^\dagger$ の交換関係を調べる．

$$\left[\hat{a},\hat{a}^\dagger\right] = \left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x} + \mathrm{i}\sqrt{\frac{1}{2m\hbar\omega}}\hat{p}\right)\left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x} - \mathrm{i}\sqrt{\frac{1}{2m\hbar\omega}}\hat{p}\right) - \left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x} - \mathrm{i}\sqrt{\frac{1}{2m\hbar\omega}}\hat{p}\right)\left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x} + \mathrm{i}\sqrt{\frac{1}{2m\hbar\omega}}\hat{p}\right) \tag{0.0.17}$$

$$= \mathrm{i}\sqrt{\frac{1}{2m\hbar\omega}}\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}(\hat{p}\hat{x} - \hat{x}\hat{p}) - \mathrm{i}\sqrt{\frac{1}{2m\hbar\omega}}\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}(\hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x}) \tag{0.0.18}$$

$$= -\frac{\mathrm{i}}{\hbar}[\hat{x},\hat{p}] \tag{0.0.19}$$

$$= 1 \tag{0.0.20}$$

となる．

個数演算子 $\hat{n}$ を，

$$\hat{n} \coloneqq \hat{a}^\dagger\hat{a} \tag{0.0.21}$$

と定義する．個数演算子 $\hat{n}$ は，

$$\hat{n}^\dagger = \left(\hat{a}^\dagger\hat{a}\right)^\dagger = \hat{a}^\dagger\hat{a} \tag{0.0.22}$$

であるから，Hermite 演算子であり，実固有値とそれに属する固有ベクトルが存在する．

$$\hat{n}\left|n\right\rangle = n\left|n\right\rangle \tag{0.0.23}$$

を考える．まず，**式** (0.0.23) に左から $\langle n|$ をかけると，

$$\langle n|\hat{n}|n\rangle = n\langle n|n\rangle \tag{0.0.24}$$

$$\iff \left\langle n\middle|\hat{a}^\dagger\hat{a}\middle|n\right\rangle = n \tag{0.0.25}$$

$$\iff \left|\hat{a}\left|n\right\rangle\right|^2 = n \tag{0.0.26}$$

である．Hibert 空間は内積空間であるから，

$$\left|\hat{a}\left|n\right\rangle\right|^2 \geq 0 \tag{0.0.27}$$

であるので，$n \geq 0$ となる．

次に，**式** (0.0.23) に左から $\hat{a}^\dagger$ をかける．

$$\hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger\hat{a}\left|n\right\rangle = \hat{a}^\dagger n\left|n\right\rangle \tag{0.0.28}$$

$$\iff \hat{a}^\dagger\left(\hat{a}\hat{a}^\dagger - 1\right)\left|n\right\rangle = n\hat{a}^\dagger\left|n\right\rangle \tag{0.0.29}$$

$$\iff \hat{n}\left(\hat{a}^\dagger\left|n\right\rangle\right) = (n+1)\left(\hat{a}^\dagger\left|n\right\rangle\right) \tag{0.0.30}$$

$$\tag{0.0.31}$$

となる．よって，$\hat{a}^\dagger\left|n\right\rangle$ は固有値が $n+1$ の $\hat{n}$ の固有ベクトルであるから，

$$\left|n+1\right\rangle \coloneqq \frac{1}{C_{n,+}}\hat{a}^\dagger\left|n\right\rangle \tag{0.0.32}$$

$$\tag{0.0.33}$$

と定義する．$C_{n,+}$ は規格化定数である．

$$1 = \langle n+1|n+1\rangle = \frac{1}{\left|C_{n,+}\right|^2}\left\langle n\middle|\hat{a}\hat{a}^\dagger\middle|n\right\rangle \tag{0.0.34}$$

$$= \frac{1}{\left|C_{n,+}\right|^2}\left\langle n\middle|\left(\hat{a}^\dagger\hat{a} + 1\right)\middle|n\right\rangle \tag{0.0.35}$$

$$= \frac{n+1}{\left|C_{n,+}\right|}^2 \tag{0.0.36}$$

より，

$$C_{n,+} = \sqrt{n+1} \tag{0.0.37}$$

としても矛盾しない．よって，

$$\hat{a}^\dagger |n\rangle = \sqrt{n+1}\,|n+1\rangle \tag{0.0.38}$$

となる．

最後に，**式** (0.0.23) に左から $\hat{a}$ をかける．

$$\hat{a}\hat{a}^\dagger\hat{a}\,|n\rangle = \hat{a}n\,|n\rangle \tag{0.0.39}$$

$$\iff \left(\hat{a}^\dagger\hat{a}+1\right)\hat{a}\,|n\rangle = n\hat{a}\,|n\rangle \tag{0.0.40}$$

$$\iff \hat{n}(\hat{a}\,|n\rangle) = (n-1)(\hat{a}\,|n\rangle) \tag{0.0.41}$$

となる．よって，$\hat{a}\,|n\rangle$ は固有値が $n-1$ の $\hat{n}$ の固有ベクトルであるから，

$$|n-1\rangle \coloneqq \frac{1}{C_{n,-}}\hat{a}\,|n\rangle \tag{0.0.42}$$

$$\tag{0.0.43}$$

と定義する．$C_{n,+}$ は規格化定数である．

$$1 = \langle n-1|n-1\rangle = \frac{1}{|C_{n,-}|^2}\left\langle n\middle|\hat{a}^\dagger\hat{a}\middle|n\right\rangle \tag{0.0.44}$$

$$= \frac{n}{|C_{n,-}|^2} \tag{0.0.45}$$

より，

$$C_{n,-} = \sqrt{n} \tag{0.0.46}$$

としても矛盾しない．よって，

$$\hat{a}\,|n\rangle = \sqrt{n}\,|n-1\rangle \tag{0.0.47}$$

となる．**式** (0.0.47) より，n は非負整数であるべきである．もし，$n=0.5$ であるなら，**式** (0.0.47) は,

$$\hat{a}\,|0.5\rangle = \sqrt{0.5}\,|-0.5\rangle \tag{0.0.48}$$

となり，$n \geq 0$ を満たさない．一方，n が非負整数であるなら，$n=0$ のとき，

$$\hat{a}\,|0\rangle = 0 \tag{0.0.49}$$

となり，$n \geq 0$ が満たされる．

0.0.2 Hermite 多項式

以降の議論で用いるために, 特殊函数の 1 つである Hermite 多項式を紹介しておこう. Hermite 多項式は Strum-Liouville 演算子のうちの 1 つの演算子の固有函数であり，実数全体で定義された実数函数 $H_n(s)$ に対して，

$$\left(\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}s^2} - 2s\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}s} + 2n\right)H_n(s) = 0 \tag{0.0.50}$$

なる $H_n(s)$ である．なお，n は非負整数である．なお，$H_n(s)$ は適当な回数だけ微分可能であるとする．また，$H_n(s)$ が張る空間 V の内積は，$f, g \in V$ として，

$$\langle f, g\rangle \coloneqq \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}s\, f(s)g(s)\mathrm{e}^{-s^2} \tag{0.0.51}$$

である[1]．Hermite 多項式は，適切に境界条件が設定された (Hermite 性のある)Strum-Liouville 演算子の固有函数であり，そのような演算子の固有函数は直交基底となり，完全系を成すことが知られていて，実際，

$$\int_{-\infty}^{\infty} H_m(s)H_n(s)\mathrm{e}^{-s^2}\,\mathrm{d}s = \sqrt{\pi}2^n n!\delta_n^m \tag{0.0.52}$$

のように直交する．

0.0.3　波動函数を用いた Schrödinger 方程式

以下では，波動函数を用いた Schrödinger 方程式である，

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2\right)\psi(x) = E\psi(x) \tag{0.0.53}$$

を得る．

式 (0.0.3) に**式** (0.0.11) で示した $\hat{H}$ の表式を代入して，

$$\frac{1}{2}m\omega^2 \left\langle x\middle|\hat{x}^2\middle|\psi\right\rangle + \frac{1}{2m}\left\langle x\middle|\hat{p}^2\middle|\psi\right\rangle = E\psi(x) \tag{0.0.54}$$

$$\frac{1}{2}m\omega^2 x^2\psi(x) + \frac{1}{2m}\left\langle x\middle|\hat{p}^2\middle|\psi\right\rangle = E\psi(x) \tag{0.0.55}$$

となる．$\left\langle x\middle|\hat{p}^2\middle|\psi\right\rangle$ は以下のレシピで計算できる．

1. $f(x)\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\delta(x) = -\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}f(x)\delta(x)$
2. $\langle x|\hat{p}|\psi\rangle = -\mathrm{i}\hbar\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\psi(x)$
3. $\langle x|p\rangle = \dfrac{1}{\sqrt{2\pi p}}\exp\left(\mathrm{i}\dfrac{xp}{\hbar}\right)$
4. $\left\langle x\middle|\hat{p}^2\middle|\psi\right\rangle$ の計算

$\delta(x)$ はデルタ函数であり，積分して初めて意味を持つ函数である．

1. $f(x)\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\delta(x) = -\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}f(x)\delta(x)$

   左辺を積分して右辺になればよい．ただし，$f(x)$ は，

$$\lim_{|x|\to\infty} f(x) = 0 \tag{0.0.56}$$

   であるとする．実際に，

$$\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x\, f(x)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\delta(x) = [f(x)\delta(x)]_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x\,\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}f(x)\delta(x) \tag{0.0.57}$$

$$= -\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x\,\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}f(x)\delta(x) \tag{0.0.58}$$

   であるから，

$$f(x)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\delta(x) = -\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}f(x)\delta(x) \tag{0.0.59}$$

   である．

[1] Strum-Liouville 演算子の形，

$$\frac{1}{\rho(x)}\left[\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left\{p(x)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right\} + q(x)\right]$$

と，Strum-Liouville 演算子の固有函数が張る空間の内積が，

$$\int_a^b f^*(x)g(x)\rho(x)\,\mathrm{d}x$$

と書けることを思い出せば，内積に e^{-s^2} なる重み函数が入ることは自然なことである．

2. $\langle x|\hat{p}|\psi\rangle = -\mathrm{i}\hbar\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\psi(x)$

   $\langle x|[\hat{x},\hat{p}]|x'\rangle$ を 2 種類の方法で計算する．まず，愚直に計算すると，

$$\begin{aligned}\langle x|[\hat{x},\hat{p}]|x'\rangle &= \langle x|\hat{x}\hat{p}-\hat{p}\hat{x}|x'\rangle &(0.0.60)\\ &= x\langle x|\hat{p}|x'\rangle - x'\langle x|\hat{p}|x'\rangle &(0.0.61)\\ &= (x-x')\langle x|\hat{p}|x'\rangle &(0.0.62)\end{aligned}$$

   である．一方，$[\hat{x},\hat{p}]=\mathrm{i}\hbar$ を用いれば，

$$\begin{aligned}\langle x|[\hat{x},\hat{p}]|x'\rangle &= \mathrm{i}\hbar\langle x|x'\rangle &(0.0.63)\\ &= \mathrm{i}\hbar\delta(x-x') &(0.0.64)\end{aligned}$$

   2 つの方法で計算した $\langle x|[\hat{x},\hat{p}]|x'\rangle$ である**式** (0.0.62) と**式** (0.0.64) を等号で結んで，**式** (0.0.59) で示したデルタ函数の微分を用いて表現すれば，

$$\begin{aligned}\langle x|\hat{p}|x'\rangle &= \mathrm{i}\hbar\frac{\delta(x-x')}{x-x'} &(0.0.65)\\ &= -\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}(x-x')}\delta(x-x') &(0.0.66)\\ &= \mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x'}\delta(x-x') &(0.0.67)\end{aligned}$$

   となる．

   さて，$\langle x|\hat{p}|\psi\rangle$ を計算しよう．$|x\rangle$ の完全性と，**式** (0.0.67) で示した関係を用いれば，

$$\begin{aligned}\langle x|\hat{p}|\psi\rangle &= \left\langle x\middle|\hat{p}\hat{1}\middle|\psi\right\rangle &(0.0.68)\\ &= \langle x|\,\hat{p}\int\mathrm{d}x'\,|x'\rangle\langle x'|\,|\psi\rangle &(0.0.69)\\ &= \int\mathrm{d}x'\,\langle x|\hat{p}|x'\rangle\langle x'|\psi\rangle &(0.0.70)\\ &= \mathrm{i}\hbar\int\mathrm{d}x'\left[\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\delta(x-x')\right]\phi(x') &(0.0.71)\\ &= \mathrm{i}\hbar\left\{[\delta(x-x')\psi(x')]_{-\infty}^{\infty} - \int\mathrm{d}x'\,\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x'}\phi(x')\delta(x-x')\right\} &(0.0.72)\\ &= -\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\phi(x) &(0.0.73)\end{aligned}$$

   を得る．

3. $\langle x|p\rangle = \dfrac{1}{\sqrt{2\pi p}}\exp\left(\mathrm{i}\dfrac{xp}{\hbar}\right)$

   $\langle x|\hat{p}|p\rangle$ を 2 種類の方法で計算する．まず，愚直に計算すると，

$$\begin{aligned}\langle x|\hat{p}|p\rangle &= p\langle x|p\rangle &(0.0.74)\\ &= pp(x) &(0.0.75)\end{aligned}$$

   となる．ただし $p(x)$ は $|p\rangle$ の x への射影である．一方，**式** (0.0.73) で示した関係で $|\psi\rangle\to|p\rangle$ を用いると，

$$\langle x|\hat{p}|\psi\rangle = -\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}p(x) \tag{0.0.76}$$

   となる．**式** (0.0.75) と**式** (0.0.76) より，

$$\begin{aligned}-\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}p(x) &= pp(x) &(0.0.77)\\ \Rightarrow p(x) &= C\exp\left(\mathrm{i}\frac{xp}{\hbar}\right) &(0.0.78)\end{aligned}$$

となる．C は規格化定数である．

さて，C を求めるために，$\langle x|x'\rangle$ を計算すると，

$$\delta(x-x') = \langle x|x'\rangle \tag{0.0.79}$$
$$= \langle x| \int \mathrm{d}p\,|p\rangle\langle p|\,|x'\rangle \tag{0.0.80}$$
$$= \int \mathrm{d}p\,p(x)p(x') \tag{0.0.81}$$
$$= |C|^2 \int \exp\left(\mathrm{i}\frac{\mathrm{i}(x-x')p}{\hbar}\right) \tag{0.0.82}$$

となる．ところで，デルタ函数の Fouirer 変換とその逆変換が，

$$1 = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}t\,\delta(t)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t} \tag{0.0.83}$$
$$\delta(t) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\omega\,1\cdot\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t} \tag{0.0.84}$$

と書けることより，**式** (0.0.84) において，

$$\omega \to \frac{p}{\hbar} \tag{0.0.85}$$
$$t \to x - x' \tag{0.0.86}$$

と変換すれば，

$$\delta(x-x') = \frac{1}{2\pi\hbar}\int \mathrm{d}p \exp\left(\mathrm{i}\frac{x-x'}{\hbar}p\right) \tag{0.0.87}$$

となるので，係数を比較して，

$$|C|^2 = \frac{1}{2\pi\hbar} \tag{0.0.88}$$
$$\Rightarrow C = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \tag{0.0.89}$$

となる．よって，

$$\langle x|p\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp\left(\mathrm{i}\frac{xp}{\hbar}\right) \tag{0.0.90}$$

となる．

4. $\left\langle x\middle|\hat{p}^2\middle|\psi\right\rangle$ の計算

さて，いよいよ $\left\langle x\middle|\hat{p}^2\middle|\psi\right\rangle$ を計算する道具がそろった．**式** (0.0.90) を用いながら計算すると，

$$\left\langle x\middle|\hat{p}^2\middle|\psi\right\rangle = \left\langle x\middle|\hat{p}^2\hat{1}\middle|\psi\right\rangle \tag{0.0.91}$$
$$= \langle x|\,\hat{p}^2 \int \mathrm{d}p\,|p\rangle\langle p|\,|\psi\rangle \tag{0.0.92}$$
$$= \int \mathrm{d}p\,p^2\,\langle x|p\rangle\,\langle p|\psi\rangle \tag{0.0.93}$$
$$= \int \mathrm{d}p\,p^2\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\exp\left(\mathrm{i}\frac{xp}{\hbar}\right)\langle p|\psi\rangle \tag{0.0.94}$$
$$= \int \mathrm{d}p\,\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\left\{\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\left(\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\right)^2\langle x|p\rangle\right\}\langle p|\psi\rangle \tag{0.0.95}$$
$$= \left(\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\right)^2\int \mathrm{d}p\left\{\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\langle x|p\rangle\right\}\langle p|\psi\rangle \tag{0.0.96}$$

$$= \left(\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\right)^2 \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} \langle x| \left[\int \mathrm{d}p \, |p\rangle\langle p|\right] |\psi\rangle \tag{0.0.97}$$

$$= \left(\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\right)^2 \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} \langle x|\psi\rangle \tag{0.0.98}$$

$$= \left(\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\right)^2 \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} \psi(x) \tag{0.0.99}$$

となる．

式 (0.0.99) を**式** (0.0.55) に代入すれば,

$$\frac{1}{2} m\omega^2 x^2 \psi(x) + \frac{1}{2m} \left\langle x \middle| \hat{p}^2 \middle| \psi \right\rangle = E\psi(x) \tag{0.0.100}$$

$$\iff \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 \psi(x) + \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\right)^2 \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} \psi(x) = E\psi(x) \tag{0.0.101}$$

$$\iff \left(-\frac{\hbar}{2m} \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2\right) \psi(x) = E\psi(x) \tag{0.0.102}$$

となる．

0.0.4 Schrodinger の解法

いささか唐突だが，波動函数が,

$$\psi(x) = f(s) \exp\left(-\frac{s^2}{2}\right) \tag{0.0.103}$$

$$s := \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \tag{0.0.104}$$

と書けたとする．$f(s)$ が Hermite 多項式となることを示す．

式 (0.0.102) の両辺を $-\dfrac{\hbar^2}{2m}$ で割って，x から s に変数変換[2]すると,

$$\left(-\frac{\hbar}{2m} \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2\right) \psi(x) = E\psi(x) \tag{0.0.105}$$

$$\iff \left[\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} - \frac{m^2\omega^2}{\hbar^2} x^2 + \frac{2mE}{\hbar}\right] \psi(x) = 0 \tag{0.0.106}$$

$$\iff \left[\left(\frac{\mathrm{d}s}{\mathrm{d}x}\right)^2 \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}s^2} - \frac{\hbar}{m\omega} s^2 + \frac{2mE}{\hbar^2}\right] f(s) \exp\left(-\frac{s^2}{2}\right) = 0 \tag{0.0.107}$$

$$\iff \left[\frac{m\omega}{\hbar} \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}s^2} - \frac{\hbar}{m\omega} s^2 + \frac{2mE}{\hbar^2}\right] f(s) \exp\left(-\frac{s^2}{2}\right) = 0 \tag{0.0.108}$$

$$\iff \left(\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}s^2} - s^2 + \frac{2E}{\hbar\omega}\right) f(s) \exp\left(-\frac{s^2}{2}\right) = 0 \tag{0.0.109}$$

と書ける．第 1 項について，$\dfrac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}s^2} f(s) \exp\left(-\dfrac{s^2}{2}\right)$ を計算しよう．Leibniz 則より,

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}s^2} f(s) \exp\left(-\frac{s^2}{2}\right) = \frac{\mathrm{d}^2 f}{\mathrm{d}s^2} \exp\left(-\frac{s^2}{2}\right) + 2\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}s} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}s}\left(\exp\left(-\frac{s^2}{2}\right)\right) + f(s) \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}s^2}\left(\exp\left(-\frac{s^2}{2}\right)\right) \tag{0.0.110}$$

[2] この変数変換は x の無次元化ともとらえられる．実際に**式** (0.0.104) の右辺の次元を調べると,

$$\sqrt{\frac{\mathrm{kg} \cdot \mathrm{s}^{-1}}{\mathrm{kg} \cdot \mathrm{m}^2 \cdot \mathrm{s}^{-2} \cdot \mathrm{s}}} \mathrm{m} = 1$$

である．

$$= \frac{\mathrm{d}^2 f}{\mathrm{d}s^2} \exp\left(-\frac{s^2}{2}\right) - 2s\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}s} \exp\left(-\frac{s^2}{2}\right) + f(s)\bigl(s^2-1\bigr)e \exp\left(-\frac{s^2}{2}\right) \tag{0.0.111}$$

$$= \left(\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}s^2} - 2s\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}s} + \bigl(s^2-1\bigr)\right) f(s) \exp\left(-\frac{s^2}{2}\right) \tag{0.0.112}$$

と計算できるから，**式** (0.0.109) は,

$$\left(\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}s^2} - s^2 + \frac{2E}{\hbar\omega}\right) f(s) \exp\left(-\frac{s^2}{2}\right) = 0 \tag{0.0.113}$$

$$\Longleftrightarrow \left(\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}s^2} - 2s\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}s} + \bigl(s^2-1\bigr) - s^2 + \frac{2E}{\hbar\omega}\right) f(s) \exp\left(-\frac{s^2}{2}\right) = 0 \tag{0.0.114}$$

$$\Rightarrow \left(\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}s^2} - 2s\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}s} + \frac{2E}{\hbar\omega} - 1\right) f(s) = 0 \tag{0.0.115}$$

となる．Hermite 多項式の形は,

$$\left(\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}s^2} - 2s\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}s} + 2n\right) H_n(s) = 0 \tag{0.0.116}$$

であったから,

$$\frac{2E}{\hbar\omega} - 1 = 2n \tag{0.0.117}$$

$$f(s) \to H_n(s) \tag{0.0.118}$$

とすれば良いことがわかる．n は非負整数で，$n = 0$ では零点振動に対応する．規格化定数を A とすれば，波動函数は,

$$\psi_n(x) = AH_n(s) \exp\left(-\frac{s^2}{2}\right) \tag{0.0.119}$$

と書ける．規格化定数は,

$$1 = \int \mathrm{d}x \, |\psi(x)|^2 \tag{0.0.120}$$

$$= |A|^2 \int \mathrm{d}x \, H_n(s)H_n(s)\mathrm{e}^{-s^2} \tag{0.0.121}$$

$$= |A|^2 \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \int \mathrm{d}s \, H_n(s)H_n(s)\mathrm{e}^{-s^2} \tag{0.0.122}$$

$$= |A|^2 \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \sqrt{\pi} 2^n n! \tag{0.0.123}$$

より,

$$A = \sqrt{\frac{1}{2^n n!} \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}}} \tag{0.0.124}$$

となる．波動函数は,

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{1}{2^n n!} \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}}} H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x\right) \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2\right) \tag{0.0.125}$$

となる．