調和振動子

調和振動子 (単振動) 型ポテンシャル場の量子力学的運動は基底関数系の構築の例として、また場の量子論への導入において重要であることが知られている。さらに近年では 2 次元調和振動子型ポテンシャルは量子ドットなど界面における電子の閉じ込め機構のモデルにもなっている。

1　1 次元における調和振動子

シュレディンガー方程式

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

エネルギー固有値と固有関数 (2 通りの表現)

$$E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega \;\; (n = 0, 1, 2, \cdots) \tag{2}$$

$$\text{表現1：} \quad \psi_n(x) = \sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}\cdot 2^n n!}} H_n(\alpha x)\cdot \exp(-\frac{1}{2}\alpha^2 x^2), \quad \alpha \equiv \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}, \tag{3}$$

$$\text{表現2：} \quad \psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi b^2}}} H_n(\frac{x}{b})\cdot \exp(-\frac{x^2}{2b^2}), \quad b \equiv \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} = \frac{1}{\alpha}, \tag{4}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*(x)\psi_{n'}(x)dx = \delta_{nn'}. \tag{5}$$

ここで $H_n(x)$ は n 次のエルミート多項式 (後述,Schiff 版) である。

2　2 次元における非等方調和振動子

シュレディンガー方程式

$$[-\frac{\hbar^2}{2m}(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}) + \frac{1}{2}m(\omega_x^2 x^2 + \omega_y^2 y^2)]\psi(x, y) = E\psi(x, y) \tag{6}$$

エネルギー固有値と固有関数

$$E_{n_x n_y} = (n_x + \frac{1}{2})\hbar\omega_x + (n_y + \frac{1}{2})\hbar\omega_y, \;\; (n_x, n_y = 0, 1, 2, \cdots) \tag{7}$$

$$\begin{aligned}\psi_{n_x n_y}(x, y) = &\frac{1}{\sqrt{2^{n_x} n_x! \sqrt{\pi b_x^2}}} H_{n_x}(\frac{x}{b_x})\cdot \exp(-\frac{x^2}{2b_x^2}) \\ &\times \frac{1}{\sqrt{2^{n_y} n_y! \sqrt{\pi b_y^2}}} H_{n_y}(\frac{y}{b_y})\cdot \exp(-\frac{y^2}{2b_y^2})\end{aligned} \tag{8}$$

$$b_x \equiv \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_x}},\, b_y \equiv \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_y}} \tag{9}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*_{n_x n_y}(x,y)\psi_{n'_x n'_y}(x,y)dxdy = \delta_{n_x n'_x}\delta_{n_y n'_y}. \tag{10}$$

3　2次元における等方的調和振動子

シュレディンガー方程式

$$[-\frac{\hbar^2}{2m}(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2})+\frac{1}{2}m\omega^2(x^2+y^2)]\psi(x,y)=E\psi(x,y) \tag{11}$$

ここで変数変換を行う。

$$x = r\cos\phi,\, y = r\sin\phi,\, r=\sqrt{x^2+y^2},\, \tan\phi = \frac{y}{x}, \tag{12}$$

$$\rho \equiv \frac{r}{b},\, b \equiv \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}. \tag{13}$$

エネルギー固有値と固有関数

$$E_n = (n+1)\hbar\omega,\, (n=0,1,2,\cdots) \tag{14}$$

$$\psi_{nM}(r,\phi) = \sqrt{\frac{1}{\pi b^2}\cdot\frac{(\frac{n-|M|}{2})!}{[(\frac{n-|M|}{2})!]^3}}\cdot\rho^{|M|}\cdot \mathrm{e}^{-\rho^2/2}\cdot L^{|M|}_{\frac{n+|M|}{2}}(\rho^2)\cdot \mathrm{e}^{iM\phi}, \tag{15}$$

$$|M| = \begin{cases} 0,2,4,\cdots,n & (n:\text{偶数}) \\ 1,3,5,\cdots,n & (n:\text{奇数}). \end{cases} \tag{16}$$

ここで $L^{\alpha}_n(x)$ はラゲール陪多項式 (後述,Schiff 版) である。

参考文献
1) 有馬朗人、「量子力学」、朝倉書店、1984 年
2) 荒木源太郎、「量子力学」、培風館、1961 年。

4　3次元における等方的調和振動子

シュレディンガー方程式

$$[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta+\frac{1}{2}m\omega^2(x^2+y^2+z^2)]\psi(\boldsymbol{r})=E\psi(\boldsymbol{r}) \tag{17}$$

固有値と波動関数

$$E_n = (2n+\ell+\frac{3}{2})\hbar\omega\ \ (n=0,1,2,\cdots,\ell=0,1,2\cdots,n) \tag{18}$$

$$\psi_{n\ell m}(\boldsymbol{r}) \equiv R_{n\ell}(r)Y_{\ell m}(\theta,\phi)$$

$$R_{n\ell}(r) = \frac{1}{b^{\frac{3}{2}}}\sqrt{\frac{2n!}{(n+\ell+\frac{1}{2})!}} \cdot \rho^{\ell} \exp(-\frac{\rho^2}{2}) \cdot L_n^{\ell+\frac{1}{2}}(\rho^2) \tag{19}$$

$$\rho \equiv \frac{r}{b}, \;\; b \equiv \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \tag{20}$$

$$\int \psi^*_{n\ell m}(\boldsymbol{r})\psi_{n'\ell' m'}(\boldsymbol{r})d^3\boldsymbol{r} = \delta_{nn'}\delta_{\ell\ell'}\delta_{mm'}. \tag{21}$$

ここで、$R_{n\ell}(r)$ は動径波動関数、$Y_{\ell m}(\theta,\phi)$ は角度方向波動関数で今の場合には球面調和関数で表される。
行列要素の実例：

$$\langle\psi_{n\ell m}|r^2|\psi_{n\ell m}\rangle = (2n+\ell+\frac{3}{2})b^2. \tag{22}$$

5　3次元における非等方調和振動子

シュレディンガー方程式

$$[-\frac{\hbar^2}{2m}(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2})+\frac{1}{2}m(\omega_x^2x^2+\omega_y^2y^2+\omega_z^2z^2)]\psi(x,y,z) = E\psi(x,y,z) \tag{23}$$

エネルギー固有値と固有関数

$$E_{n_xn_yn_z} = (n_x+\frac{1}{2})\hbar\omega_x + (n_y+\frac{1}{2})\hbar\omega_y + (n_z+\frac{1}{2})\hbar\omega_z \;\; (n_x,n_y,n_z = 0,1,2,\cdots), \tag{24}$$

$$\begin{aligned}\psi_{n_xn_y}(x,y) = &\frac{1}{\sqrt{2^{n_x}n_x!\sqrt{\pi b_x^2}}}H_{n_x}(\frac{x}{b_x})\cdot\exp(-\frac{x^2}{2b_x^2}) \\ &\times\frac{1}{\sqrt{2^{n_y}n_y!\sqrt{\pi b_y^2}}}H_{n_y}(\frac{y}{b_y})\cdot\exp(-\frac{y^2}{2b_y^2}) \\ &\times\frac{1}{\sqrt{2^{n_z}n_z!\sqrt{\pi b_z^2}}}H_{n_z}(\frac{z}{b_z})\cdot\exp(-\frac{z^2}{2b_z^2}),\end{aligned} \tag{25}$$

$$b_x \equiv \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_x}},\; b_y \equiv \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_y}},\; b_z \equiv \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_z}},$$

$$\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*_{n_xn_yn_z}(x,y,z)\psi_{n'_xn'_yn'_z}(x,y,z)dxdyz = \delta_{n_xn'_x}\delta_{n_yn'_y}\delta_{n_zn'_z}. \tag{26}$$

5.1　エルミート多項式（Hermite polynomial）

調和振動子の量子力学的な取り扱いの際に使用される。エルミート多項式には種々の定義があり、注意を要する。

1. Schiff 教科書他
   物理関係 ([5, 6, 7, 8, 9, 13]) ではこの定義が使用されていることが多い。

$$\text{微分方程式}: (\frac{d^2}{dx^2} - 2x\frac{d}{dx} + 2n)H_n(x) = 0, \tag{27}$$

$$\text{関数表示}: H_n(x) = (-1)^n \mathrm{e}^{x^2} \frac{d^n}{dx^n}\mathrm{e}^{-x^2}, \tag{28}$$

$$\text{実例} : H_0(x) = 1, \tag{29}$$

$$H_1(x) = 2x, \tag{30}$$

$$H_2(x) = 4x^2 - 2, \tag{31}$$

$$H_3(x) = 8x^3 - 12x, \tag{32}$$

$$H_4(x) = 16x^4 - 48x^2 + 12, \tag{33}$$

$$H_5(x) = 42x^5 - 160x^3 + 120x, \tag{34}$$

$$\text{漸近公式} : H_n(x) \approx 2^n x^n, (\mathrm{as}\, x \to \infty), \tag{35}$$

$$\text{母関数} : \mathrm{e}^{2tx-t^2} = \sum_{n=0}^{\infty} H_n(x)\frac{t^n}{n!}, \tag{36}$$

$$\text{漸化式}: H_{n+1}(x) = 2xH_n(x) - 2nH_{n-1}, \tag{37}$$

$$\frac{d}{dx}H_n(x) = 2nH_{n-1}(x), \tag{38}$$

$$\text{直交関係}: \int_{-\infty}^{\infty} H_n(x)H_{n'}\mathrm{e}^{-x^2}dx = \delta_{nn'} \cdot 2^n \cdot n!\sqrt{\pi}, \tag{39}$$

$$\text{空間反転性} : H_n(-x) = (-1)^n H_n(x). \tag{40}$$

2. 岩波公式集 III[4]

$$\text{微分方程式}: (\frac{d^2}{dx^2} - x\frac{d}{dx} + n)H_n(x) = 0, \tag{41}$$

$$\text{関数表示}: H_n(x) = (-1)^n \mathrm{e}^{x^2/2} \frac{d^n}{dx^n}\mathrm{e}^{-x^2/2}, \tag{42}$$

$$\text{実例} : H_0(x) = 1, \tag{43}$$

$$H_1(x) = x, \tag{44}$$

$$H_2(x) = x^2 - 1, \tag{45}$$

$$H_3(x) = x^3 - 3x, \tag{46}$$

$$H_4(x) = x^4 - 6x^2 + 3, \tag{47}$$

$$H_5(x) = x^5 - 10x^3 + 15x, \tag{48}$$

$$\text{特別な値} : H_{2n}(0) = (-1)^n(2n-1)!!, \tag{49}$$

$$H_{2n+1}(0) = 0, \tag{50}$$

$$H'_{2n+1}(0) = (-1)^n(2n+1)!!, \tag{51}$$

$$\text{母関数} : \mathrm{e}^{tx-t^2/2} = \sum_{n=0}^{\infty} H_n(x)\frac{t^n}{n!}, \tag{52}$$

$$\text{漸化式 1}: H_{n+1}(x) = xH_n(x) - nH_{n-1}, \tag{53}$$

$$\text{漸化式 2：}\frac{d}{dx}H_n(x) = nH_{n-1}(x), \tag{54}$$

$$\text{直交関係: }\int_{-\infty}^{\infty} H_n(x)H_{n'}\mathrm{e}^{-x^2/2}dx = \delta_{nn'}n!\sqrt{2\pi}. \tag{55}$$

5.2 ラゲール多項式および陪多項式（associated Laguerre polynomial)

水素原子や 2、3 次元調和振動子の量子力学取り扱い、特に動径方向の波動関数を記述する際に使用される。エルミート多項式と同様に、いくつかの定義があることに注意すべきである。

1. Schiff 教科書 [5]
   (a) ラゲール多項式

$$\text{母関数 1 : }\frac{\mathrm{e}^{-tx/(1-t)}}{(1-t)} = \sum_{n=0}^{\infty} L_n(x)\frac{t^n}{n!}, \tag{56}$$

$$\text{微分方程式: }[x\frac{d^2}{dx^2} + (1-x)\frac{d}{dx} + n]L_n(x) = 0, \tag{57}$$

$$\text{漸化式 1：}L_{n+1}(x) = (2n+1-x)L_n(x) - n^2L_{n-1}(x), \tag{58}$$

$$\text{漸化式 2：}\frac{d}{dx}L_n(x) - n\frac{d}{dx}L_{n-1}(x) = -nL_{n-1}(x), \tag{59}$$

$$\tag{60}$$

   (b) ラゲール陪多項式

$$\text{関数表示: }L_n^{\alpha}(x) \equiv \frac{d^{\alpha}}{dx^{\alpha}}L_n(x), \tag{61}$$

$$\text{微分方程式: }[x\frac{d^2}{dx^2} + (\alpha+1-x)\frac{d}{dx} + (n-\alpha)]L_n^{\alpha}(x) = 0, \tag{62}$$

$$\text{母関数 : }\frac{(-t)^{\alpha}\mathrm{e}^{-tx/(1-t)}}{(1-t)^{\alpha+1}} = \sum_{n=\alpha}^{\infty} L_n^{\alpha}(x)\frac{t^n}{n!}, \tag{63}$$

$$\text{直交規格性 : }\int_0^{\infty} x^{\alpha}\mathrm{e}^{-x}L_m^{\alpha}(x)L_n^{\alpha}(x)dx = \delta_{mn}\frac{(n!)^3}{(n-\alpha)!} \tag{64}$$

2. 岩波公式 III[4], 岡部 [9]
   (a) ラゲール多項式

$$L_n(x) \equiv L_n^{\alpha=0}(x). \tag{65}$$

   (b) ラゲール陪多項式

$$\text{微分方程式: }[x\frac{d^2}{dx^2} + (\alpha+1-x)\frac{d}{dx} + n]L_n^{\alpha}(x) = 0, \tag{66}$$

$$\text{実例 : }L_0^{\alpha}(x) = 1, \tag{67}$$

$$L_1^{\alpha}(x) = (\alpha+1) - x, \tag{68}$$

$$L_2^{\alpha}(x) = \frac{x^2}{2} - (\alpha+2)x + \frac{1}{2}(\alpha+1)(\alpha+2) \tag{69}$$

$$L_n^{-n}(x) = (-1)^n \frac{x^n}{n!}, \tag{70}$$

$$\text{母関数 : } \frac{\exp(-\frac{tx}{1-t})}{(1-t)^{\alpha+1}} = \sum_{n=0}^{\infty} L_n^{\alpha}(x) t^n, \tag{71}$$

$$\text{漸化式 1 : } nL_n^{\alpha}(x) + (x - 2n - \alpha + 1)L_{n-1}^{\alpha}(x) \tag{72}$$

$$+(n+\alpha-1)L_{n-2}^{\alpha}(x) = 0, \tag{73}$$

$$\text{漸化式 2 : } x\frac{d}{dx}L_n^{\alpha}(x) = nL_n^{\alpha}(x) - (n+\alpha)L_{n-1}^{\alpha}(x), \tag{74}$$

$$\text{直交関係: } \int_0^{\infty} L_n^{\alpha}(x) L_{n'}^{\alpha} \mathrm{e}^{-x} x^{\alpha} dx = \delta_{nn'} \frac{(\alpha+n)!}{n!}, \tag{75}$$

3. Morse and H. Feshbach[1]

(a) ラゲール多項式

(b) ラゲール陪多項式

$$\text{関数表示: } L_n^{\alpha}(x) = \frac{(n+\alpha)!}{n!} \frac{\mathrm{e}^x}{x^{\alpha}} \frac{d^n}{dx^n}(x^{n+\alpha}\mathrm{e}^{-x}), \tag{76}$$

$$\text{微分方程式: } [x\frac{d^2}{dx^2} + (\alpha+1-x)\frac{d}{dx} + n]L_n^{\alpha}(x) = 0, \tag{77}$$

$$\text{母関数 : } \frac{\exp(-\frac{tx}{1-t})}{(1-t)^{\alpha+1}} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{L_n^{\alpha}(x)}{(n+\alpha)!} t^n, \tag{78}$$

$$\text{漸化式 1 : } (x - \alpha - 2n - 1)L_n^{\alpha}(x) = -\frac{(n+1)}{(\alpha+n+1)} L_{n+1}^{\alpha}(x) - (\alpha+n)^2 L_{n-1}^{\alpha}(x) \tag{79}$$

$$\text{漸化式 2 : } x\frac{d}{dx}L_n^{\alpha}(x) = (x-\alpha)L_n^{\alpha}(x) + (n+1)L_{n+1}^{\alpha-1}(x), \tag{80}$$

$$\text{直交規格性 : } \int_0^{\infty} x^{\alpha}\mathrm{e}^{-x} L_m^{\alpha}(x) L_n^{\alpha}(x) dx = \delta_{mn} \frac{[(n+\alpha)!]^3}{n!} \tag{81}$$

5.3 球面調和関数（spherical harmonics）

$$Y_{\ell m}(\theta,\phi) \equiv (-1)^{\frac{m+|m|}{2}} \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi} \frac{(\ell-|m|)!}{(\ell+|m|)!}} \cdot P_{\ell}^{|m|}(\cos\theta) \cdot \mathrm{e}^{im\phi} \tag{82}$$

ここで $P_{\ell}^{|m|}(\cos\theta)$ はルジャンドル陪多項式である。
直交規格性：

$$\int_0^{\pi} \sin\theta d\theta \int_0^{2\pi} d\phi \, Y_{\ell m}^*(\theta,\phi) \, Y_{\ell' m'}(\theta,\phi) = \delta_{\ell\ell'}\delta_{mm'}. \tag{83}$$

具体例:

$$Y_{00}(\theta,\phi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}, \tag{84}$$

$$Y_{1,+1}(\theta,\phi) = -\frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{2\pi}}\sin\theta \mathrm{e}^{i\phi}, \tag{85}$$

$$Y_{1,0}(\theta,\phi) = \quad \frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{\pi}}\cos\theta, \tag{86}$$

$$Y_{1,-1}(\theta,\phi) = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{2\pi}}\sin\theta \mathrm{e}^{-i\phi}, \tag{87}$$

$$Y_{2,+2}(\theta,\phi) = \frac{1}{4}\sqrt{\frac{3\cdot 5}{2\pi}}\sin^2\theta \mathrm{e}^{i2\phi} = \frac{1}{8}\sqrt{\frac{3\cdot 5}{2\pi}}(1-\cos 2\theta)\mathrm{e}^{i2\phi}, \tag{88}$$

$$Y_{2,+1}(\theta,\phi) = -\frac{1}{2}\sqrt{\frac{3\cdot 5}{2\pi}}\cos\theta\sin\theta \mathrm{e}^{i\phi} = -\frac{1}{4}\sqrt{\frac{3\cdot 5}{2\pi}}\sin 2\theta \mathrm{e}^{i\phi}, \tag{89}$$

$$Y_{2,0}(\theta,\phi) = \quad \frac{1}{4}\sqrt{\frac{5}{\pi}}(3\cos^2\theta - 1) = \frac{1}{8}\sqrt{\frac{5}{\pi}}(1+3\cos 2\theta), \tag{90}$$

$$Y_{2,-1}(\theta,\phi) = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{3\cdot 5}{2\pi}}\cos\theta\sin\theta \mathrm{e}^{-i\phi} = \frac{1}{4}\sqrt{\frac{3\cdot 5}{2\pi}}\sin 2\theta \mathrm{e}^{-i\phi}, \tag{91}$$

$$Y_{2,-2}(\theta,\phi) = \frac{1}{4}\sqrt{\frac{3\cdot 5}{2\pi}}\sin^2\theta \mathrm{e}^{-i2\phi} = \frac{1}{8}\sqrt{\frac{3\cdot 5}{2\pi}}(1-\cos 2\theta)\mathrm{e}^{-i2\phi}, \tag{92}$$

$$\tag{93}$$

特殊な値

$$Y_{\ell m}(0,0) = \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}}\delta_{m0}, \tag{94}$$

$$Y_{\ell m}(0,\phi) = \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}}\delta_{m0}. \tag{95}$$

参考文献

[1] P.M. Morse and H. Feshbach, Method of Theoretical Physics, McGraw-Hill, 1953,vol.I.

[2] 森口、宇田川, 一松、 岩波数学公式 I, 岩波書店.

[3] 森口、宇田川, 一松、 岩波数学公式 II, 岩波書店.

[4] 森口、宇田川, 一松、岩波数学公式 III, 岩波書店.

[5] L.I. Schiff,*Quantum Mechanics*,third edition, McGraw Hill,1968,pp.69-71.

[6] 小谷正雄、梅沢博臣、「大学演習量子力学」、裳華房、1992 年、p.385. 注意：微分方程式の第二項の符号 (＋) は (-) が正しい。

[7] 小出昭一郎、「量子力学（I）」、裳華房、1984 年、p.42.

[8] 岡崎　誠、「量子力学（改訂版）」、サイエンス社、1984 年、pp.49-50.

[9] 岡部成玄、「量子論　運動と方法」、近代科学社、1992 年。

[10] 田中　一、「量子力学」、近代科学社、1992 年。

[11] 有馬朗人、「量子力学」、朝倉書店、1984 年、pp.49-50.

[12] 原田義也、「量子化学」、裳華房、1984 年、p.103.

[13] J. Schwinger,*Quantum Mechanics*, Springer,2001,pp.118-119.