第9章　調和振動子

調和振動子（harmonic oscillator）はばねにつけたおもりの振動など，古典力学では基本的な重要性をもっている。重要性は量子力学でも同様である。原子・分子や原子核における微小振動，空洞中の電磁波，音波の量子化など，量子力学でも調和振動を扱うことは多い。

9.1　シュレディンガー方程式とその解

9.1.1　ハミルトニアン

調和振動子のポテンシャルは，図 9.1 に示すような 2 次曲線である：

$$V(x) \quad = \quad \frac{1}{2}m\omega^2x^2. \tag{9.1}$$

ω は古典力学では角振動数に対応し（角振動数の次元をもつ），調和振動子ポテンシャルは ω によって規定される。m は粒子の質量である。

$x=0$ でポテンシャルは 0 であり，$|x|$ が増えるほどポテンシャルは大きくなる。従って，固有状態は全て束縛状態であり，連続状態は存在しない。固有状態のエネルギー固有値は離散的なスペクトルをもつ。

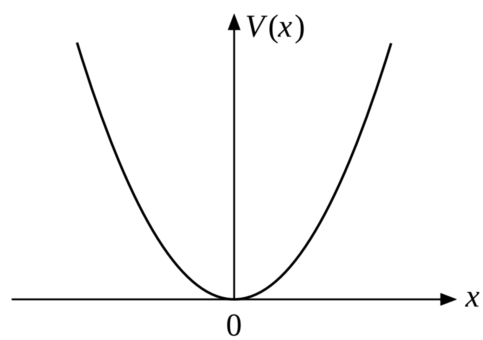

図 9.1: ポテンシャルの壁

調和振動子ポテンシャル (9.1) のもとで運動する質量 m の粒子のハミルトニアンは

$$H \quad = \quad -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2 \tag{9.2}$$

である。時間依存性を分離した後の時間に依存しないシュレディンガー方程式は，エネルギー固有値 E と固有関数 $u(x)$ を解としてもつ固有値方程式であり，次のように表される：

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2\right]u(x) \quad = \quad E\,u(x). \tag{9.3}$$

古典力学における調和振動子の解は $\sin\omega t$ と $\cos\omega t$ の線形結合で表せたが，量子力学ではそう簡単ではない。束縛状態の境界条件は

$$u(x) \ \to \ 0 \qquad (\,|x| \ \to \ \infty\,) \tag{9.4}$$

である。また，ポテンシャル (9.1) は空間反転（$x \to -x$）に対して不変であるので，

$$H(-x) \;=\; -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}(-x)^2}+\frac{1}{2}m\omega^2(-x)^2 \;=\; -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2 \;=\; H(x), \tag{9.5}$$

固有状態の波動関数 $u(x)$ は偶関数か奇関数かである。

9.1.2　漸近解と多項式法による微分方程式の解法

以下の式が簡略になるように，無次元の量を導入する：

$$s \;=\; \frac{x}{b}, \quad b \;=\; \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}, \qquad \lambda \;=\; \frac{2E}{\hbar\omega}. \tag{9.6}$$

ここに，b は長さの次元をもつ量で b-パラメータと呼ばれる。λ はエネルギー固有値 E を $\hbar\omega/2$ を単位として表したものである。上の置き換えにより，シュレディンガー方程式は

$$\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}s^2}+(\lambda-s^2)u \;=\; 0 \tag{9.7}$$

と書き換えられる。

漸近解

変形したシュレディンガー方程式 (9.7) の解を求めるにあたって，まず，波動関数 $u(s)$ の $|s|$ の大きいところを考えてみる。$|s|$ が大きくなるほど，シュレディンガー方程式の中の $(\lambda-s^2)$ で第 2 項に比べて定数である第 1 項は無視できるできるようになる：

$$\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}s^2} \;=\; s^2u. \tag{9.8}$$

ここで，次の形の解を考える：

$$u(s) \;=\; s^n\,e^{\pm s^2/2}. \tag{9.9}$$

これを (9.8) の左辺に代入すると

$$\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}s^2} \;=\; \Big[n(n-1)s^{n-2}\pm(2n+1)s^n+s^{n+2}\Big]e^{\pm s^2/2} \;\to\; s^{n+2}e^{\pm s^2/2} \tag{9.10}$$

が得られる。ここに，$|s|$ が大きくなると，s の最も高い次数の項 s^{n+2} に比べて他の 2 項が無視できることを用いた。このとき，(9.8) の左辺は右辺 s^2u に等しくなる。つまり，$|s|$ が大きいところで，(9.9) は (9.8) の解であり，すなわち，(9.7) の解である。このようなとき，(9.9) をシュレディンガー方程式 (9.7) の **漸近解**（asymptotic solution）という。

ところで，漸近解の $e^{\pm s^2/2}$ のうち正符号の $e^{+s^2/2}$ は，$|s|\to\infty$ で発散し，「波動関数は有界である」という確率解釈からの要請に反する。従って，この解は破棄する。つまり，$|s|\to\infty$ で $u(s)\to 0$ という無限遠での境界条件を満たす $e^{-s^2/2}$ を漸近解として採用する。

多項式法による微分方程式の解法

上の議論に基づいて，波動関数として次の形を仮定する：

$$u(s) \;=\; N\,H(s)\,e^{-s^2/2}. \tag{9.11}$$

ここに，N は規格化定数である。これをシュレディンガー方程式 (9.7) に代入して，$H(s)$ が満たすべき方程式を得る：

$$\frac{\mathrm{d}^2 H}{\mathrm{d}s^2} - 2s\,\frac{\mathrm{d}H}{\mathrm{d}s} + (\lambda - 1)H \;=\; 0. \tag{9.12}$$

以下，多項式法と呼ばれる，微分方程式の解法を説明する。

まず，s の関数 $H(s)$ が多項式で表せるとする：

$$H(s) \;=\; s^p\left(a_0 + a_1 s + a_2 s^2 + \cdots\right), \quad a_0 \neq 0, \;\; p \geq 0 \tag{9.13}$$

つまり，$H(s)$ は s^p を最低次とする多項式であるという意味である。多項式 (9.13) を微分方程式 (9.12) に代入する。その結果が任意の s に対して成り立つとすると，s の各次数において左辺が右辺（$= 0$）に等しいはずである：

$$\begin{aligned} p(p-1)a_0 &= 0 \\ (p+1)pa_1 &= 0 \\ (p+2)(p+1)a_2 - (2p+1-\lambda)a_0 &= 0 \\ (p+3)(p+2)a_3 - (2p+3-\lambda)a_1 &= 0 \\ \cdots \\ (p+\nu+2)(p+\nu+1)a_{\nu+2} - (2p+2\nu+1-\lambda)a_\nu &= 0 \end{aligned} \tag{9.14}$$

第 1 式は **指数方程式** と呼ばれ，$a_0 \neq 0$ の仮定より p の値が定まる。今の場合，

$$p \;=\; 0 \quad \text{または} \quad p \;=\; 1 \tag{9.15}$$

である。また，係数が満たすべき式 (9.14) の特徴として，一般に，

$$(p+\nu+2)(p+\nu+1)a_{\nu+2} - (2p+2\nu+1-\lambda)a_\nu \;=\; 0 \qquad \nu = 0,\,1,\,2,\,\cdots \tag{9.16}$$

が成り立ち，a_ν で $\nu =$ 偶数の項と $\nu =$ 奇数の項が関連していない。

ハミルトニアンは空間反転（$x \to -x$）に対して不変であるので，固有関数は正のパリティをもつか，負のパリティをもつ。波動関数を $u(s) = N\,e^{-s^2/2}H(s)$ としたが，$e^{-s^2/2}$ は空間反転に対して変化しないので，残る $H(s)$ は空間反転に対して不変であるか，符号を変える。前者は $H(s)$ が偶関数であり，後者は奇関数である。偶関数はべき展開 (9.13) で s の偶数次の項からだけなり，奇関数は s の奇数次の項だけからなる。指数方程式から定まる p の 2 つの値について，別々に考えてみる。

(1) $p = 0$ の場合

最低次の項は $a_0 \neq 0$ より 0 次の $a_0 s^0 = a_0$ であり，偶関数であるはずである：

$$p = 0: \qquad H(s) \;=\; a_0 + a_2 s^2 + a_4 s^4 + \cdots. \tag{9.17}$$

すなわち，固有関数が偶関数であることから，添え字 ν が奇数である係数 a_ν は全て 0 になる：

$$a_1 \;=\; a_3 \;=\; a_5 \;=\; \cdots \;=\; 0.$$

(2) $p = 1$ の場合

(9.14) の第 2 式から $a_1 = 0$ であり，(9.16) より a_ν の $\nu =$ 奇数の項はすべて 0 になる：

$$a_1 \;=\; a_3 \;=\; a_5 \;=\; \cdots \;=\; 0.$$

このとき，最低次の項 $a_0 s$ から始まり，

$$p = 1: \qquad H(s) \;=\; a_0 s + a_2 s^3 + a_4 s^5 + \cdots, \tag{9.18}$$

s の奇数次の項だけからなる奇関数である。

有界な解

次に，$p = 0$ の場合も $p = 1$ の場合も，波動関数が有界であるという条件から，$H(s)$ は s の多項式でなければならないことを示す。べき展開 (9.13) の最後に示した式から，ν が大きいときの隣り合う係数の比は

$$\begin{aligned}\frac{a_{\nu+2}}{a_\nu} \;&=\; \frac{(2p + 2\nu + 1 - \lambda)}{(p + \nu + 2)(p + \nu + 1)} \\ &=\; \frac{2\nu + (2p - \lambda)}{\nu^2 + (2p + 3)\nu + (p + 1)(p + 2)} \;\;\to\;\; \frac{2}{\nu}\end{aligned} \tag{9.19}$$

である。ところで，e^{s^2} の無限級数展開は次のように書ける：

$$e^{s^2} \;=\; 1 + \frac{s^2}{1} + \frac{s^4}{2!} + \cdots + b_\nu s^\nu + b_{\nu+2} s^{\nu+2} + \cdots. \tag{9.20}$$

この級数の隣り合う項の係数は

$$b_\nu \;=\; \frac{1}{(\nu/2)!}, \qquad b_{\nu+2} \;=\; \frac{1}{((\nu + 2)/2)!}$$

であるから，ν が大きいときの比は

$$\frac{b_{\nu+2}}{b_\nu} \;=\; \frac{\left(\frac{\nu}{2}\right)!}{\left(\frac{\nu}{2} + 1\right)!} \;=\; \frac{1}{\frac{\nu}{2} + 1} \qquad \to \qquad \frac{2}{\nu} \tag{9.21}$$

である。これは $a_{\nu+2}/a_\nu$ の極限 (9.19) と同じである。この一致は，$H(s)$ のべき展開 (9.13) の s^p を除く部分は e^{s^2} と程度で大きくなっていくことを示している。つまり，$H(s)$ の s についてのべき展開が無限に続くならば，$u(s) = e^{-s^2/2} H(s)$ は $e^{s^2/2}$ と同程度に s が大きいときに発散し，無限遠での境界条件を満たさない。従って，べき展開の a_k ($k = 2, 4, 6, \cdots$) にかかる係数 $(2p + 2\nu + 1 - \lambda)$ のいずれかが 0 にならなければならない。このとき，(9.14) より，それ以降の係数は全て 0 になる。

9.1.3　エネルギーの固有値と固有関数

エネルギー固有値

上の考察より，境界条件を満たす固有関数 $u(s) = e^{-s^2/2}H(s)$ の $H(s)$ は多項式であり，ある ν の値で係数が

$$2p + 2\nu + 1 - \lambda \;=\; 0$$

となることから，エネルギー固有値 λ が決まる。$p = 0$ の場合，$\lambda = 1, 5, 9, \cdots$，$p = 1$ の場合，$\lambda = 3, 7, 11, \cdots$ となる。両方の場合を合わせて

$$\lambda \;=\; 2n+1 \qquad \begin{cases} n \;=\; 0, 2, 4, \cdots & \text{偶関数} \\ n \;=\; 1, 3, 5, \cdots & \text{奇関数} \end{cases} \tag{9.22}$$

と表せる。よって，$\lambda = 2E/(\hbar\omega)$ より，エネルギー固有値は，小さいほうから番号を付けて，

$$E_n \;=\; \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega \qquad \begin{cases} n \;=\; 0, 2, 4, \cdots & \text{偶関数} \\ n \;=\; 1, 3, 5, \cdots & \text{奇関数} \end{cases} \tag{9.23}$$

である。すなわち，シュレディンガー方程式の境界条件を満たす解である束縛状態は，勝手なエネルギーをとることはできず，上の式に示すような飛び飛びの値しかとれない。取り得る値の間隔は $\hbar\omega$ で等しい。最も小さいエネルギー固有値は

$$E_0 \;=\; \frac{1}{2}\hbar\omega \qquad \text{零点エネルギー} \tag{9.24}$$

であり，0 ではない。このエネルギーを **零点エネルギー**（zero-point energy） という。零点エネルギーの物理的原因は不確定性原理であるといえる。調和振動子ポテンシャルは原点で最小になるので，ポテンシャルは粒子を原点の近くに閉じ込めようとする。位置の不確定性が小さくなると，不確定性原理によって運動量の不確定性は大きくなる。運動量の不確定性によって生じる運動エネルギーとポテンシャルエネルギーのつりあいの結果，基底状態でも最小限必要なエネルギーとして零点エネルギーが生じる。

固有関数

$p = 0$ のとき固有関数は偶関数になり，a_0 を与えると，それ以降の係数は，(9.14) より得られる関係式

$$2\,a_2 \;=\; (1-\lambda)\,a_0, \qquad 12\,a_4 \;=\; (5-\lambda)\,a_2, \qquad 30\,a_6 \;=\; (9-\lambda)\,a_4, \qquad \cdots \tag{9.25}$$

によって決まる。$p = 1$ のとき固有関数は奇関数になり，係数を決める関係式は

$$6\,a_2 \;=\; (3-\lambda)\,a_0, \qquad 20\,a_4 \;=\; (7-\lambda)\,a_2, \qquad 42\,a_6 \;=\; (11-\lambda)\,a_4, \qquad \cdots \tag{9.26}$$

となる。以下，(9.22) に従って，エネルギー固有値の小さい順に $n = 0, 1, 2, \cdots$ とし，多項式も H_n と表すことにする。偶関数は (9.25) より，a_0 を用いて

$$\begin{aligned} H_0(s) &= a_0, \\ H_2(s) &= (1-2s^2)\,a_0, \\ H_4(s) &= \left(1 - 4s^2 + \frac{4}{3}s^4\right)a_0, \end{aligned} \tag{9.27}$$

奇関数は (9.26) より，

$$
\begin{aligned}
H_1(s) &= s\,a_0, \\
H_3(s) &= s\Big(1-\frac{2}{3}s^2\Big)\,a_0, \\
H_5(s) &= s\Big(1-\frac{4}{3}s^2+\frac{4}{15}s^4\Big)\,a_0,
\end{aligned}
\tag{9.28}
$$

となる。未定の定数 a_0 は規格化によって決められ，通常，次の式で定義される **エルミートの多項式**（Hermite polynomial）が用いられる：

$$
H_n(s) \;=\; (-1)^n e^{s^2}\,\frac{\mathrm{d}^n e^{-s^2}}{\mathrm{d}s^n}. \tag{9.29}
$$

はじめの幾つかをあげると

$$
\begin{aligned}
H_0(s) &= 1 \\
H_1(s) &= 2s \\
H_2(s) &= 4s^2-2 \\
H_3(s) &= 8s^3-12s \\
H_4(s) &= 16s^4-48s^2+12 \\
H_5(s) &= 32s^5-160s^3+120s
\end{aligned}
\tag{9.30}
$$

である。エルミートの多項式については次節で少し詳しく説明する。最後に，波動関数 $u(x)$ を規格化して規格化定数 N を決定する：

$$
\int_{-\infty}^{+\infty} |\,u(x)\,|^2\,\mathrm{d}x \;=\; 1. \tag{9.31}
$$

エルミート多項式 $H_n(x)$ は (9.39) に示すように，e^{-x^2} を重み関数として直交関数系をなす：

$$
\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2} H_n(x) H_m(x)\,\mathrm{d}x \;=\; \delta_{nm}\sqrt{\pi}\,2^n n!.
$$

その結果，変数 s を x に戻して

$$
u_n(x) \;=\; \left(\frac{1}{\pi b^2}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \exp\left(-\frac{x^2}{2b^2}\right) H_n(x/b) \tag{9.32}
$$

と表せる。具体的に，$n=0-3$ の固有関数は

$$
\begin{aligned}
u_0(x) &= \left(\frac{1}{\pi b^2}\right)^{1/4} \exp\left(-\frac{x^2}{2b^2}\right) \\
u_1(x) &= \left(\frac{4}{\pi b^2}\right)^{1/4} \exp\left(-\frac{x^2}{2b^2}\right) \frac{x}{b} \\
u_2(x) &= \left(\frac{4}{\pi b^2}\right)^{1/4} \exp\left(-\frac{x^2}{2b^2}\right) \Big[\Big(\frac{x}{b}\Big)^2-\frac{1}{2}\Big] \\
u_3(x) &= \left(\frac{4}{9\pi b^2}\right)^{1/4} \exp\left(-\frac{x^2}{2b^2}\right) \Big[\Big(\frac{x}{b}\Big)^3-\frac{3}{2}\,\frac{x}{b}\Big]
\end{aligned}
\tag{9.33}
$$

である。

図 9.2 にエネルギーが低い方から 6 つの固有状態の波動関数 u_n (9.32) を示す。波動関数の値が遠方で 0 になる高さ（水平な直線）はエネルギー固有値 E_n (9.23) に対応している。基底状態は偶関数，第 1 励起状態は奇関数と，偶関数と奇関数が交互に現れる。

波動関数の 2 階微分が 0 になる点が波動関数の変曲点になる。シュレディンガー方程式 (9.3) は

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2u(x)}{\mathrm{d}x^2} \;=\; (E-V(x))\,u(x)$$

であるから，左辺の 2 階微分が 0 になるのは x の値は $u(x)=0$ を満たす x か，あるいは，$E-V(x)=0$ を満たす x である。後者は，古典力学で運動が許される範囲の端の点である。$E-V(x)=0$ を満たす 2 つの点の間では $E>V(x)$ であり，古典運動の範囲であり，2 点の外側では $E<V(x)$ であって古典的には運動が許されない。その境で波動関数は変曲点になる。ポテンシャルは $V(x)=\frac{1}{2}\omega^2x^2=\frac{1}{2}\hbar\omega(x/b)^2$ と表せるので，$E_n-V(x)=0$ を満たす x の値は

$$x \;=\; \pm\sqrt{n+\frac{1}{2}}\,b$$

である。

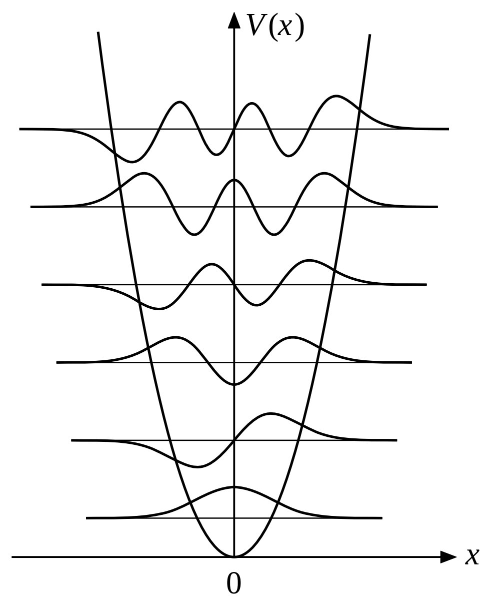

図 9.2: 調和振動子の固有状態波動関数

不確定性

基底状態 $u_0(x)$ における不確定性を考えてみる。座標 x の期待値は $(u_0(x))^2$ が偶関数であるので，明らかに $\langle\, x\,\rangle = 0$ である。また，運動量 $p=-i\hbar(\mathrm{d}/\mathrm{d}x)$ の期待値も，x による微分が因子 $-x/b^2$ を出すので，同様に $\langle\, p\,\rangle = 0$ である。x^2 の期待値は

$$\langle\, x^2\,\rangle \;=\; \int_{-\infty}^{+\infty}\left(\frac{1}{\pi b^2}\right)^{1/2} x^2\exp\left(-\frac{x^2}{2b^2}\right)\mathrm{d}x \;=\; \frac{\hbar}{2m\omega}$$

となる。p^2 の期待値は，

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\exp\left(-\frac{x^2}{2b^2}\right) \;=\; -\frac{1}{b^2}\Big(1-\frac{x^2}{b^2}\Big)\exp\left(-\frac{x^2}{2b^2}\right)$$

より，

$$\langle\, p^2\,\rangle \;=\; \frac{m\hbar\omega}{2}$$

が得られる。よって，$\varDelta x\,\varDelta p \;=\; \hbar/2$ である。

9.2　エルミートの多項式

9.2.1　エルミート多項式の性質

エルミートの微分方程式
エルミートの多項式は次の式（式 (9.29)）で定義される多項式である：

$$H_n(x) \;=\; (-1)^n e^{x^2} \frac{\mathrm{d}^n e^{-x^2}}{\mathrm{d}x^n}. \tag{9.34}$$

その幾つかの具体的な形は (9.30) に示した。前節における微分方程式の解法からも明らかなように，エルミートの多項式 $H_n(x)$ は，微分方程式

$$\frac{\mathrm{d}^2 H_n(x)}{\mathrm{d}x^2} - 2x \frac{\mathrm{d}H_n(x)}{\mathrm{d}x} + 2n\, H_n(x) \;=\; 0 \tag{9.35}$$

の解である。この方程式は (9.12) において $\lambda = 2n+1$ とし，s を x で表したものである。上の方程式の解は一意的に決まらないが，$e^{-x^2/2}H(x)$ が無限遠で有界であるものがエルミートの多項式である。

エルミート多項式の母関数
エルミートの多項式 $H_n(x)$ は関数 $S(x,t)$ を t で展開したときの $t^n/n!$ の係数になっている：

$$S(x,t) \;=\; e^{x^2-(t-x)^2} \;=\; e^{-t^2+2tx} \;=\; \sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_n(x)}{n!}\, t^n \tag{9.36}$$

この $S(x,t)$ を $H_n(x)$ の **母関数**（generating function）とよぶ。この式の $H_n(x)$ が (9.34) で定義される $H_n(x)$ と同じものであることは次のように示せる。(9.36) の右辺は $S(x,t)$ を t の関数とみたときの $t=0$ のまわりのマクローリン展開（Maclaurin's expansion）であるから，

$$H_n(x) \;=\; \left[\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}t^n} e^{x^2-(t-x)^2}\right]_{t=0} \;=\; e^{x^2} \left[\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}t^n} e^{-(t-x)^2}\right]_{t=0}$$

である。ここで，$u = t - x$ とおくと，上の式の括弧は e^{-u^2} の $u = -x$ における n 階の微分係数である：

$$\left[\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}u^n} e^{-u^2}\right]_{u=-x} \;=\; (-1)^n \frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n} e^{-x^2}$$

よって，(9.34) が得られる。

エルミート多項式の漸化式
エルミートの多項式について次の漸化式が成り立つ：

$$H_{n+1}(x) - 2x\, H_n(x) + 2n\, H_{n-1}(x) \;=\; 0. \tag{9.37}$$

母関数の式 (9.36)

$$e^{x^2}\, e^{-(t-x)^2} \;=\; \sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_n(x)}{n!}\, t^n$$

を t について微分し，

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

左辺の $e^{x^2}\,e^{-(t-x)^2}$ を再び母関数の式 (9.36) で置き直すと

$$-2(t-x)\sum_{n=0}^{\infty}\frac{H_n(x)}{n!}\,t^n \;=\; \sum_{n=0}^{\infty}\frac{H_{n+1}(x)}{n!}\,t^n.$$

この式は任意の t に対して成り立つので，t^n の係数は両辺で等しい。左辺に t の 1 次の因子 $t-x$ があることに注意して (9.37) が得られる。

エルミート多項式の導関数

エルミートの多項式の導関数はエルミートの多項式になる：

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}H_n(x) \;=\; 2n\,H_{n-1}(x). \tag{9.38}$$

ただし，$n=0$ の場合は，H_{n-1} は定義されていないが，$H_0(x)=1$ であるので，導関数は 0 になる。今度は，母関数の式 (9.36)

$$e^{x^2}\,e^{-(t-x)^2} \;=\; \sum_{n=0}^{\infty}\frac{H_n(x)}{n!}\,t^n$$

を x について微分する。左辺は微分の後，$e^{x^2}\,e^{-(t-x)^2}$ を母関数の式 (9.36) で置き直すと

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}e^{x^2}\,e^{-(t-x)^2} \;=\; [\,2x+2(t-x)\,]\,e^{x^2}\,e^{-(t-x)^2} \;=\; 2s\sum_{n=0}^{\infty}\frac{H_n(x)}{n!}\,t^n \;=\; 2\sum_{n=0}^{\infty}\frac{H_n(x)}{n!}\,t^{n+1},$$

右辺は

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{H_n(x)}{n!}\,t^n \;=\; \sum_{n=0}^{\infty}\frac{\mathrm{d}H_n(x)}{\mathrm{d}x}\,\frac{1}{n!}\,t^n$$

になる。すなわち，

$$2\sum_{n=0}^{\infty}\frac{H_n(x)}{n!}\,t^{n+1} \;=\; \sum_{n=0}^{\infty}\frac{\mathrm{d}H_n(x)}{\mathrm{d}x}\,\frac{1}{n!}\,t^n$$

が成り立つ。t^n の係数が両辺で等しいことから，

$$\frac{2\,H_{n-1}(x)}{(n-1)!} \;=\; \frac{\mathrm{d}H_n(x)}{\mathrm{d}x}\,\frac{1}{n!},$$

よって，(9.38) が得られる。

　エルミート多項式の漸化式 (9.37) と導関数の式 (9.38) を用いると，エルミートの多項式 $H_n(x)$ が微分方程式 (9.35) の解になっていることが容易に確かめられる。漸化式 (9.37) で n を $n-1$ で置き換えた式も成り立つ

$$H_n(x)-2x\,H_{n-1}(x)+2(n-1)\,H_{n-2}(x) \;=\; 0.$$

ここで，導関数の式 (9.38) より

$$\begin{aligned} H_{n-1}(x) &= \frac{1}{2n}\frac{\mathrm{d}H_n}{\mathrm{d}x} \\ H_{n-2}(x) &= \frac{1}{2(n-1)}\frac{\mathrm{d}H_{n-1}}{\mathrm{d}x} = \frac{1}{2(n-1)}\frac{1}{2n}\frac{\mathrm{d}^2H_{n-1}}{\mathrm{d}x^2}. \end{aligned}$$

これらを上の式に代入すると，エルミート多項式が満たす微分方程式 (9.35) が得られる。

9.2.2　エルミート直交関数系

エルミート多項式は e^{-x^2} を重み関数として直交関数系をなす：

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2} H_n(x) H_m(x)\,\mathrm{d}x = \delta_{nm}\sqrt{\pi}\,2^n n!. \tag{9.39}$$

直交性は次のように示すことができる。エルミート多項式の母関数より

$$e^{-x^2/2}e^{-x^2+2sx} = e^{-x^2/2}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{H_n(x)}{n!}s^n, \qquad e^{-x^2/2}e^{-x^2+2tx} = e^{-x^2/2}\sum_{m=0}^{\infty}\frac{H_n(x)}{m!}t^n$$

であるが，両式をかけ合わせて x で積分する：

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2+2sx}e^{-x^2+2tx}e^{-x^2}\,\mathrm{d}x = \sum_{n=0}^{\infty}\sum_{m=0}^{\infty}\frac{s^n t^m}{n!\,m!}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2}H_n(x)H_m(x)\,\mathrm{d}x$$

左辺の積分は

$$e^{2st}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-(x-s-t)^2}\,\mathrm{d}x = e^{2st}\sqrt{\pi} = \sqrt{\pi}\sum_{\ell=0}^{\infty}\frac{(2st)^\ell}{\ell!}$$

であるので，

$$\sum_{n=0}^{\infty}\sum_{m=0}^{\infty}\frac{s^n t^m}{n!\,m!}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2}H_n(x)H_m(x)\,\mathrm{d}x = \sqrt{\pi}\sum_{\ell=0}^{\infty}\frac{(2st)^\ell}{\ell!}$$

が成り立つ。この式の両辺の st のべきを比較すると，右辺の n と m が異なる $s^n m^m$ に相当する項が左辺にはない。従って，直交関係

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2}H_n(x)H_m(x)\,\mathrm{d}x = 0, \quad (\,n \neq m\,) \tag{9.40}$$

が得られる。$n = m$ の項は

$$\sqrt{\pi}\,\frac{(2st)^n}{n!} = \frac{(st)^n}{(n!)^2}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2}\Big(H_n(x)\Big)^2\,\mathrm{d}x$$

であり，これより $n = m$ の場合の積分が得られる。