

# 量子力学の応用例 -ポテンシャル問題-

調和振動子 — 百年休まずに，チクタク，チクタク—

調和振動子を量子力学で取扱う．まず，1次元で考えて古典的ハミルトニアンは以下で与えられる．

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

古典力学でのこの系の運動方程式は

$$\dot{x} = \frac{\partial H}{\partial p} = \frac{p}{m}, \quad \dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial x} = -kx \implies m\ddot{x} = -kx$$

となって，よく知られた調和振動子の運動， $x(t) = A \cos(\omega t) + B \sin(\omega t)$ ， $\omega = \sqrt{k/m}$  ( $A, B$  は初期条件で決まる定数)，を表す．

量子力学へ移行するため，運動量  $p$  を運動量演算子  $-i\hbar \frac{d}{dx}$  で置き換え，系のエネルギーを  $E$  とし，時間に依存しないシュレーディンガー方程式を得る．

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

ここで  $x = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} z$ ， $\psi(x) = \phi(z)$  と置くと，この方程式は以下のように変形できる．

$$\begin{aligned} \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{m\omega}{\hbar} \frac{d^2}{dz^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 \frac{\hbar}{m\omega} z^2 \right] \phi(z) &= E\phi(z) \\ -\frac{\hbar\omega}{2} \left[ \frac{d^2}{dz^2} - z^2 \right] \phi(z) &= E\phi(z) \\ \frac{d^2\phi(z)}{dz^2} + (\lambda - z^2)\phi(z) &= 0 \quad (\lambda = \frac{2E}{\hbar\omega}) \end{aligned}$$

この微分方程式を解くと (数学的補足参照)，次の結果が得られる．

$$\begin{aligned} \lambda &= 2n + 1 \quad (n = 0, 1, 2, \dots) \\ \phi(z) &= e^{-z^2/2} H_n(z) \end{aligned}$$

ここで  $H_n(z)$  はエルミート多項式である． $\lambda, z$  を  $E, x$  に戻して

$$\begin{aligned} E_n &= \hbar\omega(n + \frac{1}{2}) \quad (n = 0, 1, 2, \dots) \\ \psi_n(x) &= C_n e^{-m\omega x^2/(2\hbar)} H_n(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x) \end{aligned}$$

を得る．ここで  $n$  は系を特徴づける量子数であり， $C_n$  は規格化の定数である． $C_n$  を求めるにはエルミート多項式の直交性

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} H_n(x) H_m(x) dx = 2^n n! \sqrt{\pi} \delta_{nm}$$

を用いる．

$$\begin{aligned} 1 &= \int_{-\infty}^{\infty} |\psi_n(x)|^2 dx = |C_n|^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-m\omega x^2/\hbar} \{H_n(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x)\}^2 dx \\ \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x = s \text{ と置いて} &= |C_n|^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-s^2} \{H_n(s)\}^2 \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} ds = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} |C_n|^2 2^n n! \sqrt{\pi} \\ C_n &= \left( \frac{1}{2^n n! \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega} \pi}} \right)^{1/2} \end{aligned}$$

物理的に興味深いのは、 $n = 0$  の状態でもエネルギーは  $E_0 = \hbar\omega/2$  という 0 でない有限の値をとることである。エネルギーが 0 になるには運動エネルギー  $\frac{p^2}{2m}$  と位置エネルギー  $\frac{1}{2}m\omega^2 x^2$  が同時に 0、すなわち  $p = x = 0$  とならねばならないが、不確定原理  $\Delta x \Delta p \geq \hbar/2$  のため、そのような状況は量子力学的には実現不可能である。

$$\left\langle \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \right\rangle \geq 2\sqrt{\left\langle \frac{p^2}{2m} \right\rangle \left\langle \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \right\rangle} = \omega\sqrt{\langle p^2 \rangle \langle x^2 \rangle} \geq \frac{\hbar\omega}{2}$$

これを零点振動という。

### 中心力ポテンシャルの下での粒子 —世界の中心で...—

3次元で時間に依存しないシュレーディンガー方程式を考える。

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{r}) \right] \psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}), \quad (\Delta = \nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2})$$

ポテンシャル  $V(\vec{r})$  が距離  $|\vec{r}|$  だけの関数になっていて、方向に依存しない中心力ポテンシャルの場合を取り扱う。座標を  $(x, y, z)$  から球座標  $(r, \theta, \phi)$  に変換する。

$$x = r \sin \theta \cos \phi, \quad y = r \sin \theta \sin \phi, \quad z = r \cos \theta \quad (0 \leq r, \quad 0 \leq \theta \leq \pi, \quad 0 \leq \phi \leq 2\pi)$$

このときラプラシアン  $\Delta$  の関数  $f$  への作用は以下のように表される。

$$\begin{aligned} \Delta f &= \frac{\partial^2 f}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial f}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 f}{\partial \theta^2} + \frac{\cos \theta}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial f}{\partial \theta} + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 f}{\partial \phi^2} \\ &= \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} (rf) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left[ \sin \theta \frac{\partial f}{\partial \theta} \right] + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 f}{\partial \phi^2} \end{aligned}$$

これを用いてシュレーディンガー方程式を書き直すと、ポテンシャルは  $r$  だけの関数なので

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[ \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{\cos \theta}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right] \psi(\vec{r}) + V(r)\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r})$$

となる。波動関数  $\psi$  が  $\psi = R(r)Y(\theta, \phi)$  と変数分離の形にかけるとしてシュレーディンガー方程式に代入し、両辺を  $RY/r^2$  で割る。

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \left[ \frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR}{dr} \right] Y - \frac{\hbar^2}{2m} R \left[ \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 Y}{\partial \theta^2} + \frac{\cos \theta}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial Y}{\partial \theta} + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 Y}{\partial \phi^2} \right] + V(r)RY = ERY \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{r^2}{R} \left[ \frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR}{dr} \right] + r^2(V(r) - E) - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{Y} \left[ \frac{\partial^2 Y}{\partial \theta^2} + \frac{\cos \theta}{\sin \theta} \frac{\partial Y}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 Y}{\partial \phi^2} \right] = 0 \end{aligned}$$

左辺の  $r^2(V(r) - E)$  までの部分は  $r$  だけの関数であり、残りの部分は  $\theta, \phi$  の関数となる。任意の  $r, \theta, \phi$  で、この和が 0 (定数) となるにはそれぞれの部分もまた定数でなければならない。

$$\frac{1}{Y} \left[ \frac{\partial^2 Y}{\partial \theta^2} + \frac{\cos \theta}{\sin \theta} \frac{\partial Y}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 Y}{\partial \phi^2} \right] = -\lambda \quad (\text{定数})$$

この方程式は  $\lambda = \ell(\ell + 1)$  ( $\ell$  は 0 以上の整数) の場合に限り、意味を持つ。(後の角運動量の章で説明する。) よって  $R$  についての方程式は次のようになる。

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[ \frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR}{dr} \right] + \left[ V(r) + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\ell(\ell + 1)}{r^2} \right] R = ER$$

ここで  $\frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2m r^2}$  の部分は遠心力ポテンシャルとよばれる．古典力学で，角速度  $\omega$  で半径  $r$  の円運動をしている系の遠心力は，角運動量  $L = mvr$  で表せば

$$mr\omega^2 = \frac{mv^2}{r} = \frac{(mvr)^2}{mr^3} = \frac{L^2}{mr^3}$$

となるので， $L$  が一定の場合  $\int_r^\infty \frac{L^2}{mr'^3} dr' = \frac{L^2}{2mr^2}$  を遠心力を導くポテンシャルとして考えることができる．この結果と対応させると， $\hbar^2 \ell(\ell+1)$  が (角運動量)<sup>2</sup> に相当する．(角運動量の章で具体的に導出する．)

水素原子 —宇宙は水素でできている—

ポテンシャル  $V(r)$  が電気のクーロン力による場合を考える．中心に  $Ze$  ( $Z$  は原子番号， $e = 1.6 \times 10^{-19}$  [C] は電気素量) の電荷を持つ原子核があり，その周囲に電子 (電荷  $-e$ ，質量  $m$ ) が一つあるとする．

$$V(r) = -k \frac{Ze^2}{r} \quad (k = \frac{1}{4\pi\epsilon_0})$$

位置エネルギーが負であるので，電子が束縛されて無限遠にいかないためには，電子のエネルギー  $E$  も負でなくてはならない．動径方向の波動関数  $R$  の満たすべき方程式は

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[ \frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR}{dr} \right] + \left[ -k \frac{Ze^2}{r} + \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2m r^2} \right] R = ER = -|E|R$$

$$\frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR}{dr} + \left[ \frac{2mkZe^2}{\hbar^2} \frac{1}{r} - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right] R = \frac{2m|E|}{\hbar^2} R$$

$$r = As \text{ と置くと} \quad \frac{1}{A^2} \frac{d^2 R}{ds^2} + \frac{1}{A^2} \frac{2}{s} \frac{dR}{ds} + \left[ \frac{2mkZe^2}{\hbar^2} \frac{1}{As} - \frac{\ell(\ell+1)}{A^2 s^2} \right] R = \frac{2m|E|}{\hbar^2} R$$

$$A = \frac{\hbar}{\sqrt{8m|E|}} \text{ として} \quad \frac{d^2 R}{ds^2} + \frac{2}{s} \frac{dR}{ds} + \left[ \frac{mkZe^2}{\hbar\sqrt{2m|E|}} \frac{1}{s} - \frac{\ell(\ell+1)}{s^2} \right] R = \frac{1}{4} R$$

$$\lambda = \frac{mkZe^2}{\hbar\sqrt{2m|E|}} \text{ として} \quad \frac{d^2 R}{ds^2} + \frac{2}{s} \frac{dR}{ds} + \left[ -\frac{1}{4} + \frac{\lambda}{s} - \frac{\ell(\ell+1)}{s^2} \right] R = 0$$

$s(r)$  が十分大きい領域を考え，そこで  $R$  や  $dR/ds$  は大きな値をとらない (とると波動関数の値が大きくなって確率が 1 を超える) と考えると， $1/s$ ,  $1/s^2$  に関わる項は無視できる．このとき

$$\frac{d^2 R}{ds^2} - \frac{1}{4} R \simeq 0$$

これを解いて， $s \rightarrow \infty$  で  $R \simeq e^{\pm s/2}$  を得る． $R \simeq e^{+s/2}$  は  $s \rightarrow \infty$  で発散するので採用しない． $R = e^{-s/2} u(s)$  において元の方程式へ代入すると，

$$\frac{d}{ds} R = \frac{d}{ds} (e^{-s/2} u) = \left( -\frac{1}{2} u + u' \right) e^{-s/2}$$

$$\frac{d^2}{ds^2} R = \frac{d}{ds} \left[ \left( -\frac{1}{2} u + u' \right) e^{-s/2} \right] = \left[ -\frac{1}{2} \left( -\frac{1}{2} u + u' \right) + \left( -\frac{1}{2} u' + u'' \right) \right] e^{-s/2} = \left[ \frac{u}{4} - u' + u'' \right] e^{-s/2}$$

よって

$$\left[ \frac{u}{4} - u' + u'' \right] e^{-s/2} + \frac{2}{s} \left( -\frac{1}{2} u + u' \right) e^{-s/2} + \left[ -\frac{1}{4} + \frac{\lambda}{s} - \frac{\ell(\ell+1)}{s^2} \right] u e^{-s/2} = 0$$

$$u'' + \left(\frac{2}{s} - 1\right)u' + \left[\frac{\lambda - 1}{s} - \frac{\ell(\ell + 1)}{s^2}\right]u = 0$$

この方程式を解くのに， $u = s^q \sum_{i=0}^{\infty} a_i s^i$  を代入する．

$$\begin{aligned} & \sum_{i=0}^{\infty} (q+i)(q+i-1)a_i s^{q+i-2} + \left(\frac{2}{s} - 1\right) \sum_{i=0}^{\infty} (q+i)a_i s^{q+i-1} + \left[\frac{\lambda - 1}{s} - \frac{\ell(\ell + 1)}{s^2}\right] \sum_{i=0}^{\infty} a_i s^{q+i} = 0 \\ & \sum_{i=0}^{\infty} (q+i)(q+i-1)a_i s^{q+i-2} + \sum_{i=0}^{\infty} 2(q+i)a_i s^{q+i-2} - \sum_{i=0}^{\infty} (q+i)a_i s^{q+i-1} \\ & + \sum_{i=0}^{\infty} (\lambda - 1)a_i s^{q+i-1} - \ell(\ell + 1) \sum_{i=0}^{\infty} a_i s^{q+i-2} = 0 \\ & \sum_{i=0}^{\infty} [(q+i)(q+i-1) + 2(q+i) - \ell(\ell + 1)]a_i s^{q+i-2} + \sum_{i=0}^{\infty} [\lambda - 1 - (q+i)]a_i s^{q+i-1} = 0 \\ & [q(q+1) - \ell(\ell + 1)]a_0 s^{q-2} + \sum_{i=1}^{\infty} \{[(q+i)(q+i+1) - \ell(\ell + 1)]a_i + (\lambda - q - i)a_{i-1}\} s^{q+i-2} = 0 \end{aligned}$$

任意の  $s$  で上の式が成り立つには  $s$  の各べきの係数が 0 でなくてはならないので，

$$\begin{aligned} q(q+1) - \ell(\ell + 1) &= 0 \\ [(q+i)(q+i+1) - \ell(\ell + 1)]a_i + (\lambda - q - i)a_{i-1} &= 0 \end{aligned}$$

最初の式から  $q = \ell$ ， $-\ell - 1$  が出る． $q = -\ell - 1$  は  $u$  が  $s = 0$  で発散するので採用しない． $q = \ell$  を 2 番目の式に代入し

$$\begin{aligned} & [(\ell + i)(\ell + i + 1) - \ell(\ell + 1)]a_i + (\lambda - \ell - i)a_{i-1} = 0 \\ & i(i + 2\ell + 1)a_i + (\lambda - \ell - i)a_{i-1} = 0 \\ & a_i = \frac{\ell + i - \lambda}{i(i + 2\ell + 1)} a_{i-1} \end{aligned}$$

$s \rightarrow \infty$  で  $e^{-s/2}u$  が無限大にならないために，ある自然数  $i$  で  $\ell + i - \lambda = 0$  となって級数が有限で終わることを要求する． $\ell$  は 0 以上の整数だから  $\lambda = \ell + i$  は自然数となるので，それを  $n$  と記す．このとき

$$E = -\frac{(mkZe^2)^2}{2m\hbar^2\lambda^2} = -\frac{mk^2Z^2e^4}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2} = -\frac{mZ^2e^2}{32\pi\epsilon_0^2\hbar^2} \frac{1}{n^2}$$

となり，エネルギー  $E$  は自然数  $n$  で規定されるとびとびの値をとる．この結果は以前にボーアの原子模型の取り扱いで得られた結果と一致している．以下に留意すべき点を上げておく

- $n = \ell + i$  なので， $(i, \ell)$  の取りうる値は  $(n, 0)$ ， $(n - 1, 1)$ ， $\dots$ ， $(1, n - 1)$  となり， $\ell$  の範囲は 0 から  $n - 1$  までである．
- 得られたエネルギーの式を変形すると

$$E = -\frac{mk^2Z^2e^4}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2} = -\frac{k}{2} \frac{Ze^2}{(a_0/Z)} \frac{1}{n^2}, \quad a_0 = \frac{\hbar^2}{kme^2}$$

となる．この  $a_0$  は水素原子 ( $Z = 1$ ) の場合の電子の最低軌道の半径に相当し，ボーア半径とよばれる．

- こうして得られる多項式  $u$  はラゲールの多項式とよばれる．

この結果から得られる原子の性質については，角運動量の量子力学的取扱いを説明したのちに改めて解説する．

# 数学的補足

## エルミート多項式

微分方程式

$$\frac{d^2}{dx^2}f(x) + (\lambda - x^2)f(x) = 0 \quad (\lambda \text{ は正の定数})$$

を解くために、まず  $x \rightarrow \infty$  での振る舞いを考えると  $(\lambda - x^2)$  の  $\lambda$  は  $x^2$  に比べて無視できる．ここで  $f(x) = e^{y(x)}$  と仮定して代入すると、

$$[y'' + (y')^2]e^y - x^2e^y = 0 \Rightarrow y'' + (y')^2 - x^2 = 0$$

( ' は  $x$  についての微分を意味する . ) ここで、さらに  $y = ax^n$  ( $x = 0$  が特異点にならないよう  $n \geq 0$ ) と置いてみると

$$n(n-1)ax^{n-2} + a^2n^2x^{2n-2} - x^2 = 0$$

$n > 0$  で  $x \rightarrow \infty$  では  $|x^{n-2}| \ll |x^{2n-2}|$  なので、第一項を無視すると  $n = 2$ ,  $a = \pm 1/2$ .  $x \rightarrow \infty$  で発散しない解を得るためには  $a = -1/2$  を選び、 $f(x) \sim e^{-x^2/2}$  となる．よって  $f(x) = u(x)e^{-x^2/2}$  において元の微分方程式に代入すると、

$$\begin{aligned} [u'' - 2xu' - (1 - x^2)u]e^{-x^2/2} + (\lambda - x^2)ue^{-x^2/2} &= 0 \\ u'' - 2xu' + (\lambda - 1)u &= 0 \end{aligned}$$

最後に現れた  $u$  についての方程式はエルミートの微分方程式とよばれる．この微分方程式についても  $u(x) = e^{z(x)}$  を代入してみると

$$[z'' + (z')^2 - 2xz' + (\lambda - 1)]e^z = 0$$

$z = bx^n$  を代入して

$$bn(n-1)x^{n-2} + b^2n^2x^{2n-2} - 2bnx^n + (\lambda - 1) = 0$$

$x \rightarrow \infty$  で  $b^2n^2x^{2n-2} - 2bnx^n = 0$  より  $n = 2$ ,  $b = 1$ . しかし、これでは  $f(x) \sim e^{x^2}e^{-x^2/2} = e^{x^2/2}$  となり、 $x \rightarrow \infty$  で発散してしまう．一方、エルミートの微分方程式の解を得るために、 $u(x) = \sum_{k=0} a_k x^k$  と置いて代入すると

$$\begin{aligned} \sum_{k=2} k(k-1)a_k x^{k-2} - 2x \sum_{k=1} ka_k x^{k-1} + (\lambda - 1) \sum_{k=0} a_k x^k &= 0 \\ \sum_{k=0} [(k+2)(k+1)a_{k+2} + (-2k + \lambda - 1)a_k] x^k &= 0 \end{aligned}$$

よって

$$a_{k+2} = \frac{(2k - \lambda + 1)}{(k+2)(k+1)} a_k$$

ここで、ある整数  $n$  のときに  $2n - \lambda + 1 = 0$  となれば、 $u(x)$  は有限級数となり、前にのべた問題 ( $x \rightarrow \infty$  で発散) は無くなる．よって、 $x \rightarrow \infty$  で意味のある解を得るためには

$$\lambda = 2n + 1 \quad (n = 0, 1, 2, 3, \dots)$$

という条件が出てくる．

$n = 0$  のとき :  $\lambda = 1$

$$u(x) = a_0 \Rightarrow f(x) = a_0 e^{-x^2/2}$$

$n = 1$  のとき :  $\lambda = 3$

$$u(x) = a_1 x \Rightarrow f(x) = a_1 x e^{-x^2/2}$$

$n = 2$  のとき :  $\lambda = 5$

$$u(x) = a_0(1 - 2x^2) \Rightarrow f(x) = a_0(1 - 2x^2)e^{-x^2/2}$$

$n = 3$  のとき :  $\lambda = 7$

$$u(x) = a_1(x - \frac{2}{3}x^3) \Rightarrow f(x) = a_1(x - \frac{2}{3}x^3)e^{-x^2/2}$$

⋮

と決定されていく .  $u(x)$  の一般的な形を求めよう .  $\lambda = 2n + 1$  を元の微分方程式に代入すると

$$u'' - 2xu' + 2nu = 0$$

ここで  $G(x, t) = e^{2xt-t^2}$  を考え ,  $t$  についてテーラー展開し , その係数を  $H_n(x)$  とする .

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

この両辺に  $\frac{d}{dx}, \frac{d^2}{dx^2}, t \frac{d}{dt}$  を作用させると ,

$$\begin{aligned} \frac{d}{dx} e^{2xt-t^2} &= 2te^{2xt-t^2} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \frac{dH_n}{dx} t^n \\ \frac{d^2}{dx^2} e^{2xt-t^2} &= 4t^2 e^{2xt-t^2} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \frac{d^2 H_n}{dx^2} t^n \\ t \frac{d}{dt} e^{2xt-t^2} &= t(2x - 2t)e^{2xt-t^2} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_n(x)}{n!} n t^n \end{aligned}$$

これから

$$0 = 4t^2 - 2x \times 2t + 2t(2x - 2t)]e^{2xt-t^2} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left[ \frac{d^2 H_n}{dx^2} - 2x \frac{dH_n}{dx} + 2nH_n \right] t^n$$

すなわち ,  $H_n(x)$  が微分方程式  $u'' - 2xu' + 2nu = 0$  の解となる . この  $H_n(x)$  をエルミート多項式 ,  $G(x, t) = e^{2xt-t^2}$  をエルミート多項式の母関数という . エルミート多項式の一般的な形を求めるために , 母関数を展開すると

$$\begin{aligned} e^{2xt-t^2} &= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(2xt - t^2)^k}{k!} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} \sum_{\ell=0}^k \frac{k!}{\ell!(k-\ell)!} (2xt)^{k-\ell} (-t^2)^\ell \\ k + \ell = n \text{ として} &= \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{\ell=0}^{[n/2]} \frac{(-1)^\ell (2x)^{n-2\ell}}{\ell!(n-2\ell)!} t^n = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{t^n}{n!} \left[ \sum_{\ell=0}^{[n/2]} \frac{(-1)^\ell n! (2x)^{n-2\ell}}{\ell!(n-2\ell)!} \right] \end{aligned}$$

ここで  $[n/2]$  は  $n/2$  を超えない最大の整数である。(和の取り直しについては図を参照せよ。) 最後の結果の  $[ ]$  内が  $H_n(x)$  の定義なので,

$$H_n(x) = \sum_{\ell=0}^{[n/2]} \frac{(-1)^\ell n! (2x)^{n-2\ell}}{\ell! (n-2\ell)!}$$

を得る.  $n = 0, 1, 2, 3$  の場合で具体的に計算すると

$$H_0(x) = \frac{(-1)^0 0! (2x)^{0-2 \times 0}}{0! (0-2 \times 0)!} = 1$$

$$H_1(x) = \frac{(-1)^0 1! (2x)^{1-2 \times 0}}{0! (1-2 \times 0)!} = 2x$$

$$H_2(x) = \frac{(-1)^0 2! (2x)^{2-2 \times 0}}{0! (2-2 \times 0)!} + \frac{(-1)^1 2! (2x)^{2-2 \times 1}}{1! (2-2 \times 1)!} = 4x^2 - 2$$

$$H_3(x) = \frac{(-1)^0 3! (2x)^{3-2 \times 0}}{0! (3-2 \times 0)!} + \frac{(-1)^1 3! (2x)^{3-2 \times 1}}{1! (3-2 \times 1)!} = 8x^3 - 12x$$

となって,  $a_0, a_1$  を適当に選んだ場合の以前の結果と一致している.

