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

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

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 $-i\hbar\dfrac{d}{dx}$ で置き換え，系のエネルギーを E として，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 $x = \sqrt{\dfrac{\hbar}{m\omega}}z$，$\psi(x) = \phi(z)$ と置くと，この方程式は以下のように変形できる．

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{m\omega}{h}\frac{d^2}{dz^2} + \frac{1}{2}m\omega^2\frac{\hbar}{m\omega}z^2\right]\phi(z) = E\phi(z)$$

$$-\frac{\hbar\omega}{2}\left[\frac{d^2}{dz^2} - z^2\right]\phi(z) = E\phi(z)$$

$$\frac{d^2\phi(z)}{dz^2} + (\lambda - z^2)\phi(z) = 0 \quad (\lambda = \frac{2E}{\hbar\omega})$$

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．

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

$$\phi(z) = e^{-z^2/2}H_n(z)$$

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

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

$$\psi_n(x) = C_n e^{-m\omega x^2/(2\hbar)}H_n(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x)$$

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．

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

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 $\dfrac{p^2}{2m}$ と位置エネルギー $\dfrac{1}{2}m\omega^2x^2$ 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．

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

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,θ,ϕ) に変換する．

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

このときラプラシアン Δ 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 ψ 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．

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

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 θ,ϕ の関数となる．任意の r,θ,ϕ 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 $\lambda=\ell(\ell+1)$ (ℓ 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．

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

ここで $\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{\ell(\ell+1)}{r^2}$ 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 ω 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，$\dfrac{L^2}{2mr^2}$ 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，$\hbar\sqrt{\ell(\ell+1)}$ が角運動量に相当する．(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，$e=1.6\times10^{-19}$[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 も負でなくてはいけない．動径方向の波動関数 R の満たすべき方程式は

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

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

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

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

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

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

$$\frac{d^2R}{ds^2}-\frac{1}{4}R\simeq0$$

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

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

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

よって

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

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

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

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

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

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

$s\to\infty$ 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．ℓ 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,ℓ) の取りうる値は $(n,0), (n-1,1), \dots, (1,n-1)$ となり，ℓ 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 $x \to \infty$ での振る舞いを考えると $(\lambda - x^2)$ の λ 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，

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

($'$ 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 $x \to \infty$ では $|x^{n-2}| \ll |x^{2n-2}|$ なので，第一項を無視すると $n = 2$，$a = \pm 1/2$．$x \to \infty$ 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 $f(x) = u(x)e^{-x^2/2}$ とおいて元の微分方程式に代入すると，

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

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

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

$x \to \infty$ 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，$x \to \infty$ 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

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

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 ($x \to \infty$ で発散) は無くなる．よって，$x \to \infty$ で意味のある解を得るためには

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

という条件が出てくる．

$n=0$ **のとき** : $\lambda=1$

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

$n=1$ **のとき** : $\lambda=3$

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

$n=2$ **のとき** : $\lambda=5$

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

$n=3$ **のとき** : $\lambda=7$

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

$\vdots$

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 $\dfrac{d}{dx}, \dfrac{d^2}{dx^2}, t\dfrac{d}{dt}$ を作用させると，

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

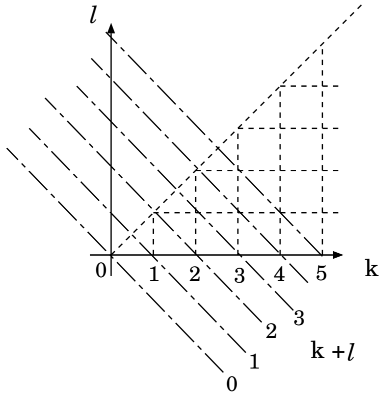
これらから

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

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

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

$$\begin{aligned}
H_1(x) &= \frac{(-1)^0 1!(2x)^{1-2\times 0}}{0!(1-2\times 0)!} = 2x \\
H_2(x) &= \frac{(-1)^0 2!(2x)^{2-2\times 0}}{0!(2-2\times 0)!} + \frac{(-1)^1 2!(2x)^{2-2\times 1}}{1!(2-2\times 1)!} = 4x^2 - 2 \\
H_3(x) &= \frac{(-1)^0 3!(2x)^{3-2\times 0}}{0!(3-2\times 0)!} + \frac{(-1)^1 3!(2x)^{3-2\times 1}}{1!(3-2\times 1)!} = 8x^3 - 12x
\end{aligned}$$

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．