特集／

シュレディンガー方程式と厳密解

ー 解ける仕組みと新しい直交多項式の発見 ー

小 竹　悟

1. はじめに

量子力学の基礎方程式である**シュレディンガー方程式**は，調和振動子や水素原子に対して厳密解を与えることができ，それらは量子力学の発展において重要な役割を果たしたし，また，調和振動子の生成消滅演算子の概念は場の量子論の進展に欠かせないものであった．数理物理としては，解ける模型の中に見い出される構造に美しさを感じ，より一般的な構造や新しい構造を見つけようとして，研究が進んできた．

本稿では 1 次元のシュレディンガー方程式の束縛状態を考える．時間に依存するシュレディンガー方程式

$$i\hbar\partial_t\psi(t,x)=\mathcal{H}\psi(t,x),\quad \|\psi\|<\infty \tag{1}$$

において，時間依存性を $\psi(t,x)=e^{-i\mathcal{E}t/\hbar}\phi(x)$ と分離すると，

$$\mathcal{H}\phi(x)=\mathcal{E}\phi(x),\quad \|\phi\|<\infty \tag{2}$$

という時間に依らないシュレディンガー方程式が得られる．ハミルトニアンは $\mathcal{H}=\frac{1}{2m}p^2+U(x)$，運動量は $p=-i\hbar\partial_x$ であるが，式を見易くするために，$\hbar$, m などを 1 にとり，$2U$, $2\mathcal{H}$ を改めて U, $\mathcal{H}$ と書くことにしよう．つまりハミルトニアンと運動量を

$$\mathcal{H}=p^2+U(x),\quad p=-i\partial_x \tag{3}$$

とする．

2. スツルム・リューヴィルの定理

シュレディンガー方程式 (2)–(3) は 2 階の微分方程式

$$-\partial_x^2\phi(x)+U(x)\phi(x)=\mathcal{E}\phi(x)$$

である．座標 x の範囲を $x_1\le x\le x_2$ とし，適当な境界条件 (例えば，$\phi(x_j)=\partial_x\phi(x_j)=0$ $(j=1,2)$) を課したものを考える．内積を $(f,g)\stackrel{\text{def}}{=}\int_{x_1}^{x_2}dx\,f(x)^*g(x)$ とする．ある種の 2 階微分方程式に対する境界値問題は**スツルム・リューヴィルの問題**と呼ばれ，解の性質を述べた定理が知られている[1)]．それを今の場合に述べておくと，

- $\mathcal{H}\phi_n(x)=\mathcal{E}_n\phi_n(x)\quad(n=0,1,2,\ldots)$,
  $0=\mathcal{E}_0<\mathcal{E}_1<\mathcal{E}_2<\cdots.$ (4)
- $\phi_n(x)$ は $x_1<x<x_2$ に n 個の零点を持ち，$\phi_n(x)$ の相隣りあう零点の間に $\phi_{n-1}(x)$ の零点がある． (5)
- $(\phi_n,\phi_m)=h_n\delta_{nm}\quad(0<h_n<\infty).$ (6)

ここで，基底状態のエネルギーが 0 となるように位置エネルギーの原点をずらしておいた．一次元の束縛状態には縮退がなく，(5) は振動定理 (部分積分を利用) を用いて示される．固有関数 $\phi_n(x)$ 達はヒルベルト空間の完全系をなしており，実に選んでおく．

本稿で述べる**解ける模型**とは，シュレディンガー方程式 (4) のエネルギー固有値 $\mathcal{E}_n$ と固有関数 $\phi_n(x)$ が全て具体的に書き表されているものを言う．スツルム・リューヴィルの定理は，$\mathcal{E}_n$ と $\phi_n(x)$ が存在することを保証する存在定理であり，このお蔭で安心して計算を進めることができるが，$\mathcal{E}_n$ と $\phi_n(x)$ の具体形をどのように求めるかについては何も教えてくれない．

3. クラムの定理とその拡張

基底状態 $\phi_0(x)$ は $x_1<x<x_2$ に零点を持たないので

$$\phi_0(x) = e^{w(x)},\quad w(x):\ \textbf{プレポテンシャル}$$

と書いておこう．これを (4) に代入するとポテンシャル $U(x)$ がプレポテンシャルを用いて $U = (\partial_x w)^2 + \partial_x^2 w$ と表されることが分かる．するとハミルトニアンは

$$\mathcal{H} = \mathcal{A}^\dagger \mathcal{A},\quad \mathcal{A} \stackrel{\text{def}}{=} \partial_x - \partial_x w(x)$$

と因数分解され ($\mathcal{A}^\dagger = -\partial_x - \partial_x w(x)$)，基底状態は $\mathcal{A}\phi_0(x) = 0$ で特徴付けされる．

このハミルトニアン $\mathcal{H}$ と固有関数 $\phi_n(x)$ に対して，$\mathcal{A}$ と $\mathcal{A}^\dagger$ の順序を入れ替えた新しいハミルトニアン $\mathcal{H}^{[1]}$ と関数 $\phi_n^{[1]}(x)$

$$\mathcal{H}^{[1]} \stackrel{\text{def}}{=} \mathcal{A}\mathcal{A}^\dagger,\ \ \phi_n^{[1]}(x) \stackrel{\text{def}}{=} \mathcal{A}\phi_n(x)\ \ (n = 1, 2, \ldots)$$

を定義する．このような変換は**ダルブー変換**と呼ばれる．すると $\mathcal{H}^{[1]}\phi_n^{[1]} = \mathcal{A}\mathcal{A}^\dagger\mathcal{A}\phi_n = \mathcal{A}\mathcal{E}_n\phi_n = \mathcal{E}_n\phi_n^{[1]}$ となるので，$\phi_n^{[1]}(x)$ は $\mathcal{H}^{[1]}$ の固有関数であることが分かる．$\phi_n^{[1]}(x)$ から $\phi_n(x)$ への対応は $\phi_n(x) = \frac{1}{\mathcal{E}_n}\mathcal{A}^\dagger\phi_n^{[1]}(x)$ である．また，$(\phi_n^{[1]}, \phi_m^{[1]}) = (\mathcal{A}\phi_n, \mathcal{A}\phi_m) = (\phi_n, \mathcal{A}^\dagger\mathcal{A}\phi_m) = \mathcal{E}_m(\phi_n, \phi_m) = \mathcal{E}_n h_n \delta_{nm}$ である．振動定理の議論を用いて $\phi_n^{[1]}(x)$ が $x_1 < x < x_2$ に $n-1$ 個の零点を持つことが示されるので[2)]，スツルム・リューヴィルの定理により，$\phi_n^{[1]}(x)$ が完全系を張ることになる．この新しい系は (基底状態のエネルギーを除いて) 元の系とスペクトルが同じ系になっている．この新しい系の基底状態 $\phi_1^{[1]}(x)$ を $e^{w^{[1]}(x)} \stackrel{\text{def}}{=} |\phi_1^{[1]}(x)|$ と書いておくと，$\mathcal{H}^{[1]}$ は

$$\mathcal{H}^{[1]} = \mathcal{A}^{[1]\dagger}\mathcal{A}^{[1]} + \mathcal{E}_1 = p^2 + U^{[1]}(x) + \mathcal{E}_1,$$
$$\mathcal{A}^{[1]} \stackrel{\text{def}}{=} \partial_x - \partial_x w^{[1]}(x),\quad \mathcal{A}^{[1]}\phi_1^{[1]}(x) = 0,$$
$$U^{[1]}(x) = \big(\partial_x w^{[1]}(x)\big)^2 + \partial_x^2 w^{[1]}(x)$$

と表される．図 1 参照.

この $\mathcal{H}^{[1]}$ は ($+\mathcal{E}_1$ の項を除いて) 元の $\mathcal{H}$ と同様に因子化されているので，同じ操作が可能である．つまり $\mathcal{A}^{[1]}$ と $\mathcal{A}^{[1]\dagger}$ の順序を入れ替えた新しいハミルトニアン $\mathcal{H}^{[2]}$ と関数 $\phi_n^{[2]}(x)$ $(n = 2, 3, \ldots)$ を

$$\mathcal{H}^{[2]} \stackrel{\text{def}}{=} \mathcal{A}^{[1]}\mathcal{A}^{[1]\dagger} + \mathcal{E}_1,\ \ \phi_n^{[2]}(x) \stackrel{\text{def}}{=} \mathcal{A}^{[1]}\phi_n^{[1]}(x)$$

と定義すると，$\mathcal{H}^{[2]}\phi_n^{[2]} = (\mathcal{A}^{[1]}\mathcal{A}^{[1]\dagger} + \mathcal{E}_1)\mathcal{A}^{[1]}\phi_n^{[1]} = \mathcal{A}^{[1]}(\mathcal{A}^{[1]\dagger}\mathcal{A}^{[1]} + \mathcal{E}_1)\phi_n^{[1]} = \mathcal{A}^{[1]}\mathcal{E}_n\phi_n^{[1]} = \mathcal{E}_n\phi_n^{[2]}$ 及び $\phi_n^{[1]}(x) = \frac{1}{\mathcal{E}_n - \mathcal{E}_1}\mathcal{A}^{[1]\dagger}\phi_n^{[2]}(x)$ 及び $(\phi_n^{[2]}, \phi_m^{[2]}) = (\mathcal{E}_m - \mathcal{E}_1)(\phi_n^{[1]}, \phi_m^{[1]})$ が分かる．また，$\phi_n^{[2]}(x)$ が完全系を張っている．基底状態 $\phi_2^{[2]}(x)$ を $e^{w^{[2]}(x)} \stackrel{\text{def}}{=} |\phi_2^{[2]}(x)|$ と書いておく．これを繰り返せば，

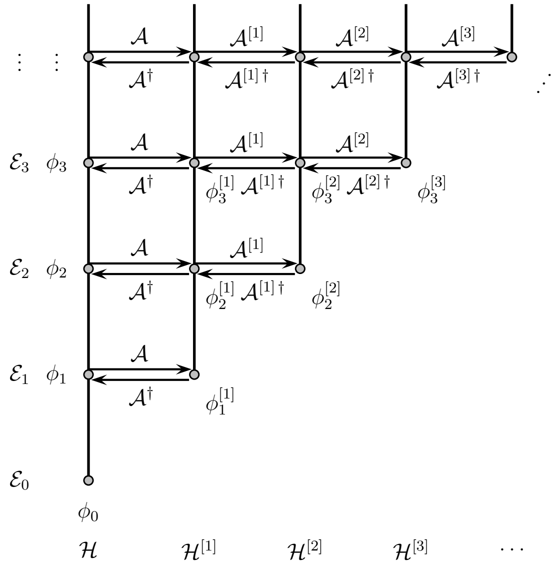

図 1　クラムの定理の描像

$$\mathcal{H}^{[M]} = \mathcal{A}^{[M]\dagger}\mathcal{A}^{[M]} + \mathcal{E}_M = p^2 + U^{[M]}(x) + \mathcal{E}_M,$$
$$\mathcal{A}^{[M]} \stackrel{\text{def}}{=} \partial_x - \partial_x w^{[M]}(x),\quad \mathcal{A}^{[M]}\phi_M^{[M]}(x) = 0,$$
$$U^{[M]}(x) = \big(\partial_x w^{[M]}(x)\big)^2 + \partial_x^2 w^{[M]}(x),$$
$$\mathcal{H}^{[M]}\phi_n^{[M]}(x) = \mathcal{E}_n\phi_n^{[M]}(x)\ \ (n = M, M+1, \ldots),$$
$$(\phi_n^{[M]}, \phi_m^{[M]}) = \prod_{j=0}^{M-1}(\mathcal{E}_n - \mathcal{E}_j)\cdot h_n\delta_{nm}$$

を得る．得られた系は $\mathcal{E}_0, \mathcal{E}_1, \ldots, \mathcal{E}_{M-1}$ に対する固有状態が取り除かれており，その他は元の系と同じスペクトルである．n 個の関数 $\{f_k(x)\}$ に対するロンスキアン ($n = 0$ では $\mathrm{W}[\cdot](x) = 1$) とその性質

$$\mathrm{W}[f_1, \ldots, f_n](x) \stackrel{\text{def}}{=} \det\big(\partial_x^{j-1} f_k(x)\big)_{1 \le j,k \le n},$$
$$\mathrm{W}\big[\mathrm{W}[f_1, \ldots, f_n, g], \mathrm{W}[f_1, \ldots, f_n, h]\big](x)$$
$$= \mathrm{W}[f_1, \ldots, f_n](x)\mathrm{W}[f_1, \ldots, f_n, g, h](x)$$

を用いると，$\phi_n^{[M]}(x)$ と $U^{[M]}(x)$ は

$$\phi_n^{[M]}(x) = \frac{\mathrm{W}[\phi_0, \phi_1, \ldots, \phi_{M-1}, \phi_n](x)}{\mathrm{W}[\phi_0, \phi_1, \ldots, \phi_{M-1}](x)},$$
$$U^{[M]}(x) = U(x) - 2\partial_x^2 \log\big|\mathrm{W}[\phi_0, \phi_1, \ldots, \phi_{M-1}](x)\big|$$

と簡潔に表される[2)]．$x_1 < x < x_2$ でロンスキアン $\mathrm{W}[\phi_0, \phi_1, \ldots, \phi_{M-1}](x)$ は 0 にならずに定符号であることが示されるので，ポテンシャル $U^{[M]}(x)$ は非特異であり，$\phi_n^{[M]}(x)$ は発散しない．隣り合う系の固有関数は $\phi_n^{[s]}(x) \stackrel{\text{def}}{=} \mathcal{A}^{[s-1]}\phi_n^{[s-1]}(x)$ $(n \ge s \ge 1)$，及び $\phi_n^{[s-1]}(x) = \frac{1}{\mathcal{E}_n - \mathcal{E}_{s-1}}\mathcal{A}^{[s-1]\dagger}\phi_n^{[s]}(x)$ という関係に

あるから，

$$\phi_n(x) = \frac{\mathcal{A}^\dagger}{\mathcal{E}_n} \frac{\mathcal{A}^{[1]\dagger}}{\mathcal{E}_n - \mathcal{E}_1} \cdots \frac{\mathcal{A}^{[n-1]\dagger}}{\mathcal{E}_n - \mathcal{E}_{n-1}} \phi_n^{[n]}(x)$$

を得る (図 1 参照)．つまり n ステップ進んだ系の基底状態が分かれば，元の系の $n+1$ 番目の固有関数が分かることになるが，この**クラムの定理**も存在定理であるため，具体形については何も教えてくれない．

今紹介したクラムの定理では基底状態から連続して M 個の固有状態を取り除いていったのだが，取り除く固有状態の選び方を拡張することができる[3]．取り除く固有状態のラベルを $\mathcal{D} = \{d_1, d_2 \ldots, d_M\}$ (d_j は 0 以上の整数で相異なる) とし，新しいポテンシャル $U_{\mathcal{D}}(x)$ と関数 $\phi_{\mathcal{D}\,n}(x)$ を

$$\begin{aligned} U_{\mathcal{D}}(x) &= U(x) - 2\partial_x^2 \log\bigl|\mathrm{W}[\phi_{d_1}, \phi_{d_2}, \ldots, \phi_{d_M}](x)\bigr|, \\ \phi_{\mathcal{D}\,n}(x) &= \frac{\mathrm{W}[\phi_{d_1}, \phi_{d_2}, \ldots, \phi_{d_M}, \phi_n](x)}{\mathrm{W}[\phi_{d_1}, \phi_{d_2}, \ldots, \phi_{d_M}](x)} \end{aligned} \qquad (7)$$

と与えると，微分方程式

$$\mathcal{H}_{\mathcal{D}} \phi_{\mathcal{D}\,n}(x) = \mathcal{E}_n \phi_{\mathcal{D}\,n}(x) \quad (n \in \mathbb{Z}_{\geq 0} \backslash \mathcal{D})$$

が成り立つことは前と同様に分かる．ここで問題は，まともな量子力学系になっているか，つまりポテンシャルが非特異になっているかどうかである．そのためには $x_1 < x < x_2$ において $\mathrm{W}[\phi_{d_1}, \phi_{d_2}, \ldots, \phi_{d_M}](x)$ が 0 にならずに定符号になっていて欲しい (すると $\phi_{\mathcal{D}\,n}(x)$ も発散しない)．この条件は，0 以上の全ての整数 m に対して $\prod_{j=1}^{M}(m - d_j) \geq 0$ が成り立っている場合に満たされる．これは，d_j 達が，0 から連続しては何個でもよく (クラムの場合に相当)，それ以外は連続する偶数個の固まりになっている事を意味する．そしてこの時 $(\phi_{\mathcal{D}\,n}, \phi_{\mathcal{D}\,m}) = \prod_{j=1}^{M}(\mathcal{E}_n - \mathcal{E}_{d_j}) \cdot h_n \delta_{nm}$ が成り立つ．図 2 参照．

解ける模型が 1 つあれば，この拡張されたクラムの定理を様々な $\mathcal{D}$ に対して適用することで，無限個の解ける模型が得られることに注意しておく (エネルギー固有値は (取り除いたもの以外は) 元の系と同じで，固有関数は (7) から具体的に得られる)．但し，それが興味深い模型となるかどうかは別問題である．

4. 具体例

解ける模型の典型例である，(i) **調和振動子**，(ii) **動径振動子** (radial oscillator) (iii) **ダルブー・ポッシェル・テラー模型**，を紹介しよう．ポテンシャルは

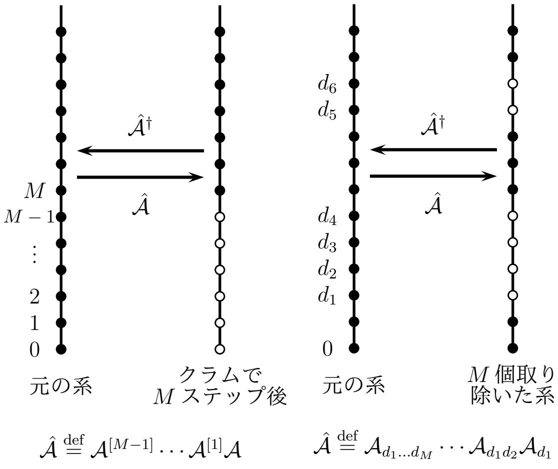

図 2　M ステップのクラムとその拡張

$$\begin{aligned} &\text{(i)} && U(x) = x^2 - 1, \\ &\text{(ii)} && U(x) = x^2 + \frac{g(g-1)}{x^2} - 2g - 1, \\ &\text{(iii)} && U(x) = \frac{g(g-1)}{\sin^2 x} + \frac{h(h-1)}{\cos^2 x} - (g+h)^2 \end{aligned}$$

で，座標の範囲はそれぞれ $-\infty < x < \infty$，$x \geq 0$，$0 \leq x \leq \frac{\pi}{2}$ である．ここで g, h は結合定数で $g, h > 1$ としておく．固有関数 $\phi_n(x)$ $(n = 0, 1, 2, \ldots)$ は

$$\phi_n(x) = \phi_0(x) P_n\bigl(\eta(x)\bigr) \qquad (8)$$

という形をしており，$P_n(\eta)$ は η の n 次式である (η の意味については §6 参照)．プレポテンシャル，エネルギー，固有多項式を与えておく：

$$\begin{aligned} &\text{(i)} && w(x) = -\tfrac{1}{2}x^2, \quad \mathcal{E}_n = 2n, \\ &&& \eta(x) = x, \quad P_n(\eta) = H_n(\eta), \\ &\text{(ii)} && w(x) = -\tfrac{1}{2}x^2 + g\log x, \quad \mathcal{E}_n = 4n, \\ &&& \eta(x) = x^2, \quad P_n(\eta) = L_n^{(g-\frac{1}{2})}(\eta), \\ &\text{(iii)} && w(x) = g\log\sin x + h\log\cos x, \\ &&& \mathcal{E}_n = 4n(n+g+h), \\ &&& \eta(x) = \cos 2x, \quad P_n(\eta) = P_n^{(g-\frac{1}{2}, h-\frac{1}{2})}(\eta). \end{aligned}$$

H_n，$L_n^{(\alpha)}$，$P_n^{(\alpha,\beta)}$ はそれぞれ**エルミート**，**ラゲール**，**ヤコビ**の多項式で，2 階の微分方程式を満たしている．$\phi_n(x)$ は直交関数系なので，$P_n(\eta(x))$ は $\phi_0(x)^2$ を重み関数とする**直交多項式**であり，$x_1 < x < x_2$ で n 個の零点を持つ．

励起状態が (8) の形でない例を一つ挙げておく：

$$U(x) = -\frac{2}{x} + \frac{g(g-1)}{x^2} + \frac{1}{g^2} \quad (x \geq 0). \qquad (9)$$

プレポテンシャル，エネルギー，固有関数は

$$w(x)=-\frac{x}{g}+g\log x,\quad \mathcal{E}_n=\frac{1}{g^2}-\frac{1}{(g+n)^2},$$
$$\phi_n(x)=L_n^{(2g-1)}\big(\tfrac{2}{g+n}x\big)x^g e^{-\frac{x}{g+n}}$$

で与えられる．

5. 解けるための十分条件 (その 1)：形状不変性

スツルム・リューヴィルの定理とクラムの定理 (及びその拡張) は存在定理であるため，具体的にエネルギー固有値や固有関数を求める方法を教えてくれなかった．これらを具体的に求める方法の一つ目として**形状不変性** (**シェイプ不変性**，shape invariance) を紹介する．この方法は因子化の方法，超対称量子力学の方法[4)]，などと呼ばれることもあるが，今の問題に対しては超対称性それ自身は不要であることを注意しておく．

系が幾つかのパラメータ $\boldsymbol{\lambda}=(\lambda_1,\lambda_2,\ldots)$ を含んでいるとし，その依存性を $\mathcal{H}(\boldsymbol{\lambda})$, $\mathcal{A}(\boldsymbol{\lambda})$, $\mathcal{E}_n(\boldsymbol{\lambda})$, $\phi_n(x;\boldsymbol{\lambda})$ などと書こう．ハミルトニアンの因子化に現れた演算子 $\mathcal{A}(\boldsymbol{\lambda})$ が

$$\mathcal{A}(\boldsymbol{\lambda})\mathcal{A}(\boldsymbol{\lambda})^\dagger=\mathcal{A}(\boldsymbol{\lambda}+\boldsymbol{\delta})^\dagger\mathcal{A}(\boldsymbol{\lambda}+\boldsymbol{\delta})+\mathcal{E}_1(\boldsymbol{\lambda})\quad(10)$$

($\boldsymbol{\delta}$ は定数) を満たしている時に，系には形状不変性があるという．これは書き換えれば

$$\begin{aligned}&\big(\partial_x w(x;\boldsymbol{\lambda})\big)^2-\partial_x^2 w(x;\boldsymbol{\lambda})\\ &=\big(\partial_x w(x;\boldsymbol{\lambda}+\boldsymbol{\delta})\big)^2+\partial_x^2 w(x;\boldsymbol{\lambda}+\boldsymbol{\delta})+\mathcal{E}_1(\boldsymbol{\lambda})\end{aligned}$$

という条件である．形状不変と言う理由は，クラムの定理と組み合わせてみると分かる．§3 の $\mathcal{H}^{[1]}$ は

$$\begin{aligned}\mathcal{H}^{[1]}(\boldsymbol{\lambda})&=\mathcal{A}(\boldsymbol{\lambda})\mathcal{A}(\boldsymbol{\lambda})^\dagger\\ &=\mathcal{A}(\boldsymbol{\lambda}+\boldsymbol{\delta})^\dagger\mathcal{A}(\boldsymbol{\lambda}+\boldsymbol{\delta})+\mathcal{E}_1(\boldsymbol{\lambda})\\ &=\mathcal{H}(\boldsymbol{\lambda}+\boldsymbol{\delta})+\mathcal{E}_1(\boldsymbol{\lambda})\end{aligned}$$

となるので， $\mathcal{H}^{[1]}$ は (付加定数 $\mathcal{E}_1$ を除いて) 元のハミルトニアンと同じ形でパラメータの値が $\boldsymbol{\delta}$ ずれているだけのものである．よって

$$\mathcal{A}^{[1]}(\boldsymbol{\lambda})=\mathcal{A}(\boldsymbol{\lambda}+\boldsymbol{\delta}),\quad \phi_n^{[1]}(x;\boldsymbol{\lambda})\propto\phi_{n-1}(x;\boldsymbol{\lambda}+\boldsymbol{\delta})$$

となる．これを続ければ

$$\begin{aligned}&\mathcal{H}^{[s]}(\boldsymbol{\lambda})=\mathcal{H}(\boldsymbol{\lambda}+s\boldsymbol{\delta})+\mathcal{E}_s(\boldsymbol{\lambda}),\\ &\mathcal{A}^{[s]}(\boldsymbol{\lambda})=\mathcal{A}(\boldsymbol{\lambda}+s\boldsymbol{\delta}),\ \phi_n^{[s]}(x;\boldsymbol{\lambda})\propto\phi_{n-s}(x;\boldsymbol{\lambda}+s\boldsymbol{\delta})\end{aligned}$$

を得て，エネルギー固有値 $\mathcal{E}_n$ と固有関数 ϕ_n が,

$$\begin{aligned}&\mathcal{E}_n(\boldsymbol{\lambda})=\sum_{s=0}^{n-1}\mathcal{E}_1(\boldsymbol{\lambda}+s\boldsymbol{\delta}),\\ &\phi_n(x;\boldsymbol{\lambda})\propto\mathcal{A}(\boldsymbol{\lambda})^\dagger\mathcal{A}(\boldsymbol{\lambda}+\boldsymbol{\delta})^\dagger\mathcal{A}(\boldsymbol{\lambda}+2\boldsymbol{\delta})^\dagger\cdots\\ &\qquad\cdots\mathcal{A}\big(\boldsymbol{\lambda}+(n-1)\boldsymbol{\delta}\big)^\dagger\phi_0(x;\boldsymbol{\lambda}+n\boldsymbol{\delta})\quad(11)\end{aligned}$$

と具体的に表されることが分かる．よって条件 (10) が満たされていれば，第 1 励起状態のエネルギー $\mathcal{E}_1$ から $\mathcal{E}_n(\boldsymbol{\lambda})$ が計算され，$\mathcal{A}$ に含まれるプレポテンシャルを用いて表される基底状態の波動関数 $\phi_0(x)=e^{w(x)}$ に微分演算子 $\mathcal{A}^\dagger$ を掛けるだけで $\phi_n(x;\boldsymbol{\lambda})$ が求められることになる ($\phi_n(x;\boldsymbol{\lambda})$ の具体形を綺麗な式で書けるかどうかは別問題である)．

§4 で与えた例には形状不変性があり，そのデータは

(i) $\boldsymbol{\lambda}$ は無し，(ii) $\boldsymbol{\lambda}=g,\ \boldsymbol{\delta}=1$,

(iii) $\boldsymbol{\lambda}=(g,h),\ \boldsymbol{\delta}=(1,1)$, (9) $\boldsymbol{\lambda}=g,\ \boldsymbol{\delta}=1$

である．式 (11)(または基底状態の寄与を取り除いたバージョン) は直交多項式の**ロドリーグ**の公式を与える．

レビュー論文を見ると，形状不変性を持つ模型のリストが載っている．これまでその数はせいぜい数十個であったが，§7 で紹介する発見によって一気に無限個に増加した．

6. 解けるための十分条件 (その 2)：閉関係式

解けるための十分条件の二つ目として，**閉関係式** (closure relation)[5)] を紹介する．これは特別な座標 $\eta=\eta(x)$ が存在して，

$$\begin{aligned}&\big[\mathcal{H},[\mathcal{H},\eta]\big]=\eta R_0+[\mathcal{H},\eta]R_1+R_{-1},\\ &R_i=R_i(\mathcal{H}):\mathcal{H}\ \text{の多項式}\end{aligned}$$

という交換関係を満たすものである．微分演算子の次数を考えると，R_0, R_1, R_{-1} はそれぞれ高々1,0,1 次式となる．§4 の例 (i)–(iii) は閉関係式が成立する：

(i) $R_0=4,\ R_1=0,\ R_{-1}=0$,

(ii) $R_0=16,\ R_1=0,\ R_{-1}=-8(\mathcal{H}+2g+1)$,

(iii) $R_0=16\big(\mathcal{H}+(g+h)^2-1\big),\ R_1=8,$
$R_{-1}=16(g-h)(g+h-1)$.

記号 $(\mathrm{ad}\mathcal{H})\eta=[\mathcal{H},\eta]$ を用いると，$(\mathrm{ad}\mathcal{H})^2\eta=[\mathcal{H},[\mathcal{H},\eta]]$, $(\mathrm{ad}\mathcal{H})^3\eta=[\mathcal{H},[\mathcal{H},[\mathcal{H},\eta]]]$, … と表されるが，閉関係式を用いると $(\mathrm{ad}\mathcal{H})^n\eta$ がやはり η, $[\mathcal{H},\eta]$, 1 の $\mathcal{H}$-係数の線型結合として具体的に表されること

が分かる (3 項間の漸化式に帰着するのでそれを解けばよい). 式 (1) は時間依存性を状態 (波動関数) に割り振った**シュレディンガー描像**での方程式であったが, 時間依存性を演算子に割り振った**ハイゼンベルグ描像**での方程式は**ハイゼンベルグ方程式** $i\partial_t A(t) = [A(t), H]$ である. その解は

$$A(t) = e^{it\mathcal{H}} A e^{-it\mathcal{H}} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(it)^n}{n!} (\mathrm{ad}\mathcal{H})^n A$$

で与えられるので, $(\mathrm{ad}\mathcal{H})^n A$ が分かればハイゼンベルグ解 $A(t)$ が得られることになる. 今 $\eta(x)$ はこの状況にあるのでハイゼンベルグ解が

$$\begin{aligned} &e^{it\mathcal{H}} \eta(x) e^{-it\mathcal{H}} = a^{(+)} e^{i\alpha_+ t} + a^{(-)} e^{i\alpha_- t} - R_{-1} R_0^{-1}, \\ &a^{(\pm)} \stackrel{\mathrm{def}}{=} \Big(\pm[\mathcal{H}, \eta(x)] \mp \big(\eta(x) + R_{-1} R_0^{-1}\big) \alpha_\mp \Big) \\ &\qquad \times (\alpha_+ - \alpha_-)^{-1}, \\ &\alpha_\pm = \alpha_\pm(\mathcal{H}) \stackrel{\mathrm{def}}{=} \tfrac{1}{2}\big(R_1 \pm \sqrt{R_1^2 + 4R_0} \big) \end{aligned}$$

と求まる. "振動数" $\alpha_\pm(\mathcal{H})$ がハミルトニアンの値によるので, 調和振動子 ($\alpha_\pm = \pm 2$ が定数) とは異なるが, 正弦関数で振動するので, この $\eta(x)$ は**シヌソイダル (sinusoidal) 座標**と呼ばれる.

調和振動子では, x のハイゼンベルク解の負振動数部分の係数 $a^{(+)}$ が**生成演算子**, 正振動数部分の係数 $a^{(-)}$ が**消滅演算子**を与えていた. 固有関数が (8) という形をしている場合には, シヌソイダル座標 $\eta(x)$ のハイゼンベルグ解に対して同じことが成り立つことが示される[5]. つまり, $a^{(\pm)}$ が生成消滅演算子を与える:

$$a^{(+)} \phi_n(x) = A_n \phi_{n+1}(x), \ \ a^{(-)} \phi_n(x) = C_n \phi_{n-1}(x).$$

ここで比例定数 A_n, C_n は, 直交多項式の**三項関係式**

$$\eta P_n(\eta) = A_n P_{n+1}(\eta) + B_n P_n(\eta) + C_n P_{n-1}(\eta)$$

に現れる係数である. 直交多項式はこの三項関係式を満たし, 逆にこの三項関係式を満たす多項式は直交多項式になることが知られている. エネルギーは $\mathcal{E}_{n\pm1} - \mathcal{E}_n = \alpha_\pm(\mathcal{E}_n)$ などの関係式を満たすことも示され, ここからエネルギー固有値 $\mathcal{E}_n$ が求まる. ($\mathcal{H}$ を含んだ表式ではあるが) 生成消滅演算子は具体的に表された微分演算子なので, 基底状態 $\phi_0(x)$ に生成演算子 $a^{(+)}$ を次々と掛けることにより励起状態 $\phi_n(x)$ が具体的に求められる. 閉関係式を満たす η と $\mathcal{H}$ は分類されており, 全て既知の模型で形状不変性がある.

例 (ii) や (iii) のように相互作用が入った系でハイゼンベルグ解が具体的に求まったことは著者にとって驚きであり, それを用いて生成消滅演算子が自然に定義されたことは新鮮であった. また, このような研究が 2006 年まで行われていなかったことは意外であった.

7. 新しい直交多項式の発見

(通常の) 直交多項式は, 0 次式から始まる多項式達 $\{P_n(x)\}_{n=0,1,\ldots}$ ($P_n(x)$ は n 次式) で, 適当な重み関数の内積で直交し, 完全系をなしている. 例えば, 重み関数が与えられた時に, 完備である単項式の集合 $\{1, x, x^2, \ldots\}$ にグラム・シュミットの正規直交化法を適用すれば直交多項式が得られる. エルミート $H_n(x)$, ラゲール $L_n^{(\alpha)}(x)$, ヤコビ $P_n^{(\alpha,\beta)}(x)$ の多項式は, 重み関数を e^{-x^2}, $x^\alpha e^{-x}$, $(1-x)^\alpha (1+x)^\beta$ に選んで得られるものである. しかし, 重み関数を適当に与えて作った直交多項式はうまい微分方程式を満たすとは限らず, むしろそのようなものは少数派である. 実際, 2 階の微分方程式を満たす (通常の) 直交多項式は, エルミート, ラゲール, ヤコビの多項式に限られるという**ボホナーの定理**がある [*1]. ボホナーの定理を回避するために, 2 階を高階に, 微分を差分に, などの変更が考えられてきたが, 最近進展があったのは,「0 次式から始まる」を「ℓ 次式から始まる」(ℓ は自然数) に変更するものである. この新しい直交多項式 $\{\mathcal{P}_n\}_{n=\ell,\ell+1,\ldots}$ は通常の直交多項式が満たすべき三項関係式を満たさず, ℓ 次式から始まるにも拘らず完全系をなしており, 更に 2 階の微分方程式を満たすものである. 例 (i)–(iii) に §3 のクラムの定理の拡張版を適用すれば, 次数が所々欠けた直交多項式 (完全系をなしている) が無数に得られるが, これは余りにも人工的であり, 本質的な意味は無いと思えるので (形状不変性も失われる), これ以上は考えないことにする. 今考えたいのは, ℓ 次以上は全ての次数が現れ, 完全系をなし, 2 階の微分方程式を満たす直交多項式である.

2008 年にゴメスウラテ・カムラン・ミルソンは, 1 次式から始まる多項式の完全系を考察し, ラゲールとヤコビの多項式を変形して, 2 階の微分方程式を満たす直交多項式を構成して, **例外 (exceptional) 直交多項式** (X_1 直交多項式) と名付けた[6]. そしてケンは, 固有関数がこの例外直交多項式で記述される量子力学系を構成し, 形状不変性があることを示した[7]. 例え

*1) もう一つベッセルの多項式 (ベッセル関数とは別物) が許されるが, 重み関数が正定値ではないのでここでは考えない.

ばラゲールの場合のポテンシャルは

$$U(x)=x^2+\frac{g(g+1)}{x^2}-2g-3 \\ +\frac{4}{x^2+g+\frac{1}{2}}-\frac{4(2g+1)}{(x^2+g+\frac{1}{2})^2}$$

である．翌年に佐々木と著者は，形状不変性を保つように (ii) と (iii) の系を変形し，全ての自然数 ℓ に対して，ℓ 次式から始まるラゲールとヤコビの例外直交多項式 (X_ℓ 直交多項式) を構成した[8)]．

我々はこの例外直交多項式を，変形に使用する多項式を目の子で見つけ，形状不変性を頼りに発見法的に構成した．その後，より系統的な構成法がないかと考えて見い出したのが，**仮想状態除去法**である[9)]．式としては §3 のクラムの定理の拡張版の (7) と同じ形の式

$$U_{\mathcal{D}}(x)=U(x)-2\partial_x^2\log\bigl|\mathrm{W}[\tilde{\phi}_{d_1},\tilde{\phi}_{d_2},\ldots,\tilde{\phi}_{d_M}](x)\bigr|,$$
$$\phi_{\mathcal{D}\,n}(x)=\frac{\mathrm{W}[\tilde{\phi}_{d_1},\tilde{\phi}_{d_2},\ldots,\tilde{\phi}_{d_M},\phi_n](x)}{\mathrm{W}[\tilde{\phi}_{d_1},\tilde{\phi}_{d_2},\ldots,\tilde{\phi}_{d_M}](x)}$$

を用いる．§3 との違いは，固有状態を取り除くのではなく，**仮想状態 (virtual state)** $\tilde{\phi}_{\mathrm{v}}(x)$ という非物理的状態を“取り除く”点にある．仮想状態の波動関数 $\tilde{\phi}_{\mathrm{v}}(x)$ は，微分方程式 $\mathcal{H}\tilde{\phi}_{\mathrm{v}}(x)=\tilde{\mathcal{E}}_{\mathrm{v}}\tilde{\phi}_{\mathrm{v}}(x)$ を満たすが，右端 ($x=x_2$) または左端 ($x=x_1$) いずれか一方の境界条件がおかしくなっているために 2 乗可積分ではない解で，ヒルベルト空間に属していない．また，逆数 $1/\tilde{\phi}_{\mathrm{v}}(x)$ も 2 乗可積分ではなく，$\tilde{\mathcal{E}}_{\mathrm{v}}<0$ とする．微分方程式 $\mathcal{H}_{\mathcal{D}}\phi_{\mathcal{D}\,n}(x)=\mathcal{E}_n\phi_{\mathcal{D}\,n}(x)$ が成り立つことは，$\tilde{\phi}_{\mathrm{v}}(x)$ が $\mathcal{H}\tilde{\phi}_{\mathrm{v}}(x)=\tilde{\mathcal{E}}_{\mathrm{v}}\tilde{\phi}_{\mathrm{v}}(x)$ を満たすことから導かれるが，問題は量子力学系としてまともなものかどうかである．これは $U_{\mathcal{D}}(x)$ が非特異，つまり $x_1<x<x_2$ で $\mathrm{W}[\tilde{\phi}_{d_1},\tilde{\phi}_{d_2},\ldots,\tilde{\phi}_{d_M}](x)$ が 0 にならずに定符号になっていればよい．例 (ii) と (iii) を考えると，元の系の離散対称性を利用してパラメータをひねることによって (例えば (iii) なら，$(g,h)\to(g,1-h)$ or $(1-g,h)$)，仮想状態が得られる (例 (i) ではひねるべきパラメータが無いので仮想状態が作れない)．そして，$\mathrm{W}[\tilde{\phi}_{d_1},\tilde{\phi}_{d_2},\ldots,\tilde{\phi}_{d_M}](x)$ の定符号性を示すことができる．§3 の固有状態を取り除く場合とは異なり，d_j に対しての条件はつかないし，$\phi_{\mathcal{D}\,n}(x)$ の n は元の系と同じく $n=0,1,2,\ldots$ で，完全に同じスペクトルである．また，形状不変性も保たれている．固有関数 $\phi_{\mathcal{D}\,n}(x)$ を書き下すと多項式 $P_{\mathcal{D},n}\bigl(\eta(x)\bigr)$ $(n=0,1,2,\ldots)$ が現れる．これは η の $\ell+n$ 次式で (ℓ は $\mathcal{D}$ で定まる自然数)，d_j 達でラベルされるので，ラゲール及びヤコビの**多添字 (multi-indexed) 直交多項式**と名付けた．$P_{\mathcal{D},n}\bigl(\eta(x)\bigr)$ は $x_1<x<x_2$ に n 個の零点を持ち，完全系をなし，2 階の微分方程式を満たしている．ヤコビの場合には，この微分方程式は $3+\ell$ 個の確定特異点を持つフックス型の微分方程式で，多添字直交多項式はその大域解を与えている．$\mathcal{D}=\{\ell\}$ の場合は例外直交多項式になる．$P_{\mathcal{D},n}$ の具体形については，興味を持たれた方は文献 9) を御覧頂きたい．

8. おわりに

ハミルトニアンを (3) の形に選んだことにより，シュレディンガー方程式は 2 階の微分方程式であった．別の形のハミルトニアンを取り，時間に依らないシュレディンガー方程式が 2 階の**差分方程式**となった系を佐々木と著者は考察し，**離散量子力学 (discrete quantum mechanics)** と呼んでいる[10)]．解ける模型の場合には，超幾何直交多項式のアスキースキームに属する直交多項式 (**アスキー・ウィルソン**，q-**ラカー**など) が現れ，本稿で紹介した方法を用いて，それらに対しても例外及び多添字直交多項式を構成することができる．

これらの新しい直交多項式は発見されたばかりだが，通常の直交多項式と同じように様々な応用が考えられ，今後の発展が期待される．

参考文献

1) 例えば，岩波数学辞典 (第 4 版)，岩波書店，186C.
2) M. M. Crum, Quart. J. Math. Oxford Ser. (2) **6** (1955) 121-127, `arXiv:physics/9908019`.
3) M. G. Krein, Doklady Acad. Nauk. CCCP, **113** (1957) 970-973; V. É. Adler, Theor. Math. Phys. **101** (1994) 1381-1386.
4) 坂本眞人：『超対称量子力学』，サイエンス社，2012.
5) S. Odake and R. Sasaki, J. Math. Phys. **47** (2006) 102102 (33pp), `arXiv:quant-ph/0605215`.
6) D. Gómez-Ullate, N. Kamran and R. Milson, J. Math. Anal. Appl. **359** (2009) 352-367, `arXiv:0807.3939`.
7) C. Quesne, J. Phys. **A41** (2008) 392001, `arXiv:0807.4087`.
8) S. Odake and R. Sasaki, Phys. Lett. **B679** (2009) 414-417, `arXiv:0906.0142`; Phys. Lett. **B684** (2010) 173-176, `arXiv:0911.3442`.
9) S. Odake and R. Sasaki, Phys. Lett. **B702** (2011) 164-170, `arXiv:1105.0508`.
10) S. Odake and R. Sasaki, J. Phys. A: Math. Theor. **44** (2011) 353001 (47pp), `arXiv:1104.0473`.

（おだけ さとる，信州大学理学部）