量子力学の演算子法（調和振動子 $\sim$ 水素原子）

緒方秀教

電気通信大学

February 26, 2022

はじめに

- 一次元調和振動子の量子力学問題 $\longrightarrow$ 演算子法的解法
  - Hamiltonian を昇降演算子（生成消滅演算子）の積に分解し，代数的に解く．
  - 昇降演算子 $\longrightarrow$ 場の量子論．
- 水素原子の量子力学問題も「演算子法」で解ける．

【参考文献】

- 伊藤祐斗，水素原子に潜む数理構造　分子科学への応用を見据えて，2019 年分子科学若手の会夏の学校第二分科会（2019 年 8 月 19 日 ∼8 月 23 日）．（ネットで検索すれば PDF が入手できる）
- 佐々木隆，可解な量子力学系の数理物理　直交多項式の生み出す多様な展開，サイエンス社 SGC ライブラリ 122，2016 年．

Contents

「補遺」は動画では説明しません．
動画に用いた PC スライドを概要欄 URL のサイトに載せますので，興味のある方は
アクセスして御覧ください．

Contents

一次元調和振動子

一次元調和振動子に対する Schrödinger 方程式

$$\widehat{H}\psi = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}q^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 q^2\right)\psi = E\psi,$$

$$m\ \text{振動子の質量},\quad \omega > 0\ \text{角振動数},$$

$$\hbar = \frac{h}{2\pi},\ h = 6.62607\,015 \times 10^{-34}\mathrm{Js}\ \text{Planck 定数}.$$

Hamiltonian を昇降演算子（生成・消滅演算子）の積に分解する．

$$\text{下降演算子（消滅演算子）}\quad \widehat{a} := \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}q} + \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}q,$$

$$\text{上昇演算子（生成演算子）}\quad \widehat{a}^\dagger := -\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}q} + \sqrt{\frac{m\omega}{2m}}q.$$

$$\widehat{H} = \hbar\omega\left(\widehat{a}^\dagger\widehat{a} + \frac{1}{2}\right).$$

一次元調和振動子

$$\widehat{H} = \hbar\omega\left(\widehat{a}^\dagger\widehat{a} + \frac{1}{2}\right).$$

$$\widehat{H}\widehat{a} = \widehat{a}(\widehat{H} - \hbar\omega), \quad \widehat{H}\widehat{a}^\dagger = \widehat{a}^\dagger(\widehat{H} + \hbar\omega). \tag{1}$$

$\varphi_n(q)$ を $\widehat{H}$ の固有値 $\hbar\omega\,(n+1/2)$ の固有関数とする（$\widehat{a}^\dagger\widehat{a}$ の固有値は n）.

$$\widehat{H}\varphi_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)\varphi_n, \quad \text{i.e.,} \quad \widehat{a}^\dagger\widehat{a}\varphi_n = n\varphi_n.$$

このとき，(1) より

$$\widehat{H}\widehat{a}\varphi_n = \hbar\omega\left((n-1) + \frac{1}{2}\right)\widehat{a}\varphi_n,$$

$$\widehat{H}\widehat{a}^\dagger\varphi_n = \hbar\omega\left((n+1) + \frac{1}{2}\right)\widehat{a}^\dagger\varphi_n.$$

- 下降演算子 $\widehat{a}$ は量子数 n をひとつ下げた固有関数を作る.
- 上昇演算子 $\widehat{a}^\dagger$ は量子数 n をひとつ上げた固有関数を作る.

一次元調和振動子

$$\widehat{H}\varphi_n = \hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)\varphi_n \quad \left(\widehat{a}^\dagger\widehat{a}\varphi_n = n\varphi_n\right).$$

量子数 $n = (\varphi_n, \widehat{a}^\dagger\widehat{a}\varphi_n) = \|\widehat{a}\varphi_n\|^2 \geq 0.$

* 関数空間の内積・ノルム

$$(\varphi,\psi) := \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}q\varphi(q)^*\psi(q), \quad \|\varphi\| := \sqrt{(\varphi,\varphi)}.$$

上昇演算子 $\widehat{a}^\dagger$ は下降演算子 $\widehat{a}$ の共役演算子である．

$$(\widehat{a}^\dagger\varphi,\psi) = (\varphi,\widehat{a}\varphi).$$

【証明】

$$(\widehat{a}^\dagger\varphi,\psi) = \int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x\left(-\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\frac{\mathrm{d}\varphi^*}{\mathrm{d}x} + \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}q\varphi^*\right)\psi$$

（部分積分により）

$$= -\underbrace{\left[\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\varphi^*\psi\right]_{x=-\infty}^{\infty}}_{0} + \int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x\varphi^*\left(\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}x} + \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}q\psi\right)$$

$$= (\varphi,\widehat{a}\psi).$$

一次元調和振動子

$$\widehat{H}\varphi_n = \hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)\varphi_n \quad \left(\,\widehat{a}^\dagger\widehat{a}\varphi_n = n\varphi_n\,\right), \quad n \geq 0.$$

下降演算子は量子数 n をひとつ下げた固有関数を作るので，

量子数 $\quad n = 0, 1, 2, \ldots$

固有エネルギー $\quad E_n = \hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right) \quad (\,n = 0, 1, 2, \ldots\,).$

一次元調和振動子

$$\widehat{H}\varphi_n = \hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)\varphi_n \quad \left(\,\widehat{a}^\dagger\widehat{a}\varphi_n = n\varphi_n\,\right), \quad n \geq 0.$$

下降演算子は量子数 n をひとつ下げた固有関数を作るので，

$$\text{量子数} \quad n = 0, 1, 2, \ldots$$

$$\text{固有エネルギー} \quad E_n = \hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right) \quad (\,n = 0, 1, 2, \ldots\,).$$

$n = 0$ より小さい量子数の固有関数は存在しないので，$\widehat{a}\varphi_0 = 0$．これより，

$$\varphi_0(q) = C\exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}q^2\right) \quad (\varphi_0(q) \text{ の具体形}).$$

一般の固有関数：$\varphi_0(q)$ に上昇演算子を次々と作用させて得られる．

$$\varphi_n(q) = \text{const.} \times (\widehat{a}^\dagger)^n\varphi_0(q) \quad (\,n = 1, 2, \ldots\,).$$

一次元調和振動子

一次元調和振動子問題に対する演算子法

- Schrödinger 方程式（固有値問題）

$$\widehat{H}\varphi_n = E_n\varphi_n.$$

- Hamiltonian を昇降演算子の積に分解する．

$$\widehat{H} = \hbar\omega\left(\widehat{a}^\dagger\widehat{a} + \frac{1}{2}\right).$$

  - 下降演算子 $\widehat{a}$：量子数 n をひとつ下げた固有関数 φ_{n-1} をつくる．
  - 上昇演算子 $\widehat{a}^\dagger$：量子数 n をひとつ上げた固有状態 φ_{n-1} をつくる．

- 量子数 n に対する制約, i.e., $n = 0, 1, 2, \ldots$.
  - エネルギー固有値：$E_n = \hbar\omega(n + 1/2)$.
  - $\widehat{a}\varphi_0 = 0$ を満たす固有関数 φ_0 の存在．
  - 一般の固有関数：$\varphi_n = (\widehat{a}^\dagger)^n\varphi_0$ ($n = 0, 1, 2, \ldots$).

一次元調和振動子

一次元調和振動子問題に対する演算子法

- Schrödinger 方程式（固有値問題）

$$\widehat{H}\varphi_n = E_n\varphi_n.$$

- Hamiltonian を昇降演算子の積に分解する．

$$\widehat{H} = \hbar\omega\left(\widehat{a}^\dagger\widehat{a} + \frac{1}{2}\right).$$

  - 下降演算子 $\widehat{a}$：量子数 n をひとつ下げた固有関数 φ_{n-1} をつくる．
  - 上昇演算子 $\widehat{a}^\dagger$：量子数 n をひとつ上げた固有状態 φ_{n-1} をつくる．

- 量子数 n に対する制約, i.e., $n = 0, 1, 2, \ldots$.
  - エネルギー固有値：$E_n = \hbar\omega(n + 1/2)$.
  - $\widehat{a}\varphi_0 = 0$ を満たす固有関数 φ_0 の存在．
  - 一般の固有関数：$\varphi_n = (\widehat{a}^\dagger)^n\varphi_0 \ (\, n = 0, 1, 2, \ldots\,)$.

これと同様の解き方が水素原子問題に対してもできる．

Contents

水素原子に対する Schrödinger 方程式

水素原子に対する Schrödinger 方程式（固有値問題）も一次元調和振動子と同様，「演算子法」で解くことができる．

水素原子に対する Schrödinger 方程式

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e}\triangle\Psi - \frac{\kappa_0}{r}\Psi = E\Psi,$$

$$\kappa_0 > 0 \text{ const.}, \quad m_e \text{ 電子の質量},$$

水素原子に対する Schrödinger 方程式

球座標 (r, θ, ϕ) を用いて Schrödinger 方程式を書き直す．

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e}\left[\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\Psi}{\partial r}\right) - \frac{\widehat{\boldsymbol{l}}^2}{\hbar^2 r^2}\Psi\right] - \frac{\kappa_0}{r}\Psi = E\Psi,$$

$$\widehat{\boldsymbol{l}}^2 \quad \text{（角運動量）}^2 \text{ の演算子.}$$

球対称問題につき，固有関数は次の形となる：

$$\Psi(r, \theta, \phi) = R_l(r) Y_{lm}(\theta, \phi),$$

$$Y_{lm}(\theta, \phi) \quad \text{球面調和関数}$$

$$\widehat{\boldsymbol{l}}^2 Y_{lm} = \hbar^2 l(l+1) Y_{lm}, \quad \widehat{l}_z Y_{lm} = \hbar m Y_{lm},$$

$$l = 0, 1, 2, \ldots \qquad \text{方位量子数,}$$

$$m = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots, \pm l \quad \text{磁気量子数.}$$

（参考）動画「量子力学で特殊関数を学ぶ（球面調和関数）」

水素原子に対する Schrödinger 方程式

動径波動関数 $R_l(r)$ に対する Schrödinger 方程式

$$-\frac{\mathrm{d}^2 R_l}{\mathrm{d}r^2} - \frac{2}{r}\frac{\mathrm{d}R_l}{\mathrm{d}r} + \frac{l(l+1)}{r^2}R_l - \frac{\kappa}{r}R_l - \frac{2m_e E}{\hbar^2}R_l = 0 \quad \left(\kappa = \frac{2m_e\kappa_0}{\hbar^2} \right).$$

$r \to 0$ では，

$$\frac{\mathrm{d}^2 R_l}{\mathrm{d}r^2} + \frac{2m_e E}{\hbar^2}R_l \approx 0,$$

$$R_l(r) \approx \text{const.} \times \exp\left(-\frac{\sqrt{-2m_e E}}{\hbar} r \right) \quad (\, r \to \infty \,).$$

束縛状態では $R_l(r) \to 0$ $(\, r \to \infty \,)$ であるから，

$$E < 0.$$

$R_l(r) = \frac{1}{r}\widetilde{R}_l(r)$ とおいて 1 階微分の項を消去する．

水素原子に対する Schrödinger 方程式

$$-\frac{\mathrm{d}^2 \widetilde{R}_l}{\mathrm{d}r^2} + \frac{l(l+1)}{r^2}\widetilde{R}_l - \frac{\kappa}{r}\widetilde{R}_l = \epsilon \widetilde{R}_l \quad \left(\epsilon = \frac{2m_e E}{\hbar^2} < 0 \right).$$

Contents

昇降演算子

水素原子に対する Schrödinger 方程式

$$\widehat{H}_l \widetilde{R}_l = \epsilon \widetilde{R}_l,$$

$$\text{Hamiltonian} \quad \widehat{H}_l := -\frac{\mathrm{d}^2 \widetilde{R}_l}{\mathrm{d}r^2} + \frac{l(l+1)}{r^2}\widetilde{R}_l - \frac{\kappa}{r}\widetilde{R}_l.$$

ここで次の昇降演算子を導入する.

昇降演算子

$\widehat{D}_l$ 降下演算子, $\widehat{D}_l^\dagger$ 上昇演算子.

$$\widehat{D}_l := \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r} + \frac{l}{r} - \frac{\kappa}{2l} = r^{-l}\exp\left(\frac{\kappa}{2l}r\right)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\left[r^l \exp\left(-\frac{\kappa}{2l}r\right)\bullet\right],$$

$$\widehat{D}_l^\dagger := -\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r} + \frac{l}{r} - \frac{\kappa}{2l} = -r^l\exp\left(-\frac{\kappa}{2l}r\right)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\left[r^{-l} \exp\left(\frac{\kappa}{2l}r\right)\bullet\right].$$

昇降演算子

$$\text{降下演算子}\quad \widehat{D}_l := \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r} + \frac{l}{r} - \frac{\kappa}{2l},$$

$$\text{上昇演算子}\quad \widehat{D}_l^\dagger := -\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r} + \frac{l}{r} - \frac{\kappa}{2l}.$$

$$\widehat{D}_l^\dagger \widehat{D}_l = -\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{\kappa}{r} + \frac{\kappa^2}{4l^2},$$

$$\widehat{D}_l \widehat{D}_l^\dagger = -\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2} + \frac{l(l-1)}{r^2} - \frac{\kappa}{r} + \frac{\kappa^2}{4l^2}$$

Hamiltonian が現れている．

Hamiltonian を昇降演算子の積に分解する．

$$\widehat{H}_l = -\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{\kappa}{r}.$$

$$\widehat{H}_l = \widehat{D}_l^\dagger \widehat{D}_l - \frac{\kappa^2}{4l^2}, \quad \widehat{H}_{l-1} = \widehat{D}_l \widehat{D}_l^\dagger - \frac{\kappa^2}{4l^2}.$$

昇降演算子

$\widetilde{R}_l(r)$ は固有エネルギー ϵ，方位量子数 l の固有波動関数であるとする．

$$\widehat{H}_l \widetilde{R}_l = \epsilon \widetilde{R}_l.$$

このとき，

- $\widehat{D}_l \widetilde{R}_l(r)$ は同じ固有エネルギー ϵ，方位量子数 $l-1$ の固有波動関数である．
- $\widehat{D}^\dagger_{l+1} \widetilde{R}_l(r)$ は同じ固有エネルギー ϵ，方位量子数 $l+1$ の固有波動関数である．

$$\widehat{H}_{l-1} \widehat{D}_l \widetilde{R}_l = \epsilon \widehat{D}_l \widetilde{R}_l,$$
$$\widehat{H}_{l+1} \widehat{D}^\dagger_{l+1} \widetilde{R}_l = \epsilon \widehat{D}^\dagger_{l+1} \widetilde{R}_l.$$

昇降演算子の役割

- 降下演算子 $\widehat{D}_l$：方位量子数 l を一つ下げた固有状態をつくる．
- 上昇演算子 $\widehat{D}^\dagger_{l+1}$：方位量子数 l を一つ上げた固有状態をつくる．

昇降演算子

$$\widehat{H}_{l-1}\widehat{D}_l\widetilde{R}_l = \epsilon\widehat{D}_l\widetilde{R}_l, \quad \widehat{H}_{l+1}\widehat{D}^\dagger_{l+1}\widetilde{R}_l = \epsilon\widehat{D}^\dagger_{l+1}\widetilde{R}_l.$$

【証明】Hamiltonian の昇降演算子の積による表示（2 通り）を用いる．

$$\begin{aligned}\widehat{H}_{l-1}\widehat{D}_l\widetilde{R}_l &= \left(\widehat{D}_l\widehat{D}^\dagger_l - \frac{\kappa^2}{4l^2}\right)\widehat{D}_l\widetilde{R}_l \\ &= \widehat{D}_l\left(\widehat{D}^\dagger_l\widehat{D}_l - \frac{\kappa^2}{4l^2}\right)\widetilde{R}_l = \widehat{D}_l\underbrace{\widehat{H}_l\widetilde{R}_l}_{\epsilon\widetilde{R}_l} = \epsilon\widehat{D}_l\widetilde{R}_l,\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\widehat{H}_{l+1}\widehat{D}^\dagger_l\widetilde{R}_l &= \left(\widehat{D}^\dagger_{l+1}\widehat{D}_{l+1} - \frac{\kappa^2}{4(l+1)^2}\right)\widehat{D}^\dagger_{l+1}\widetilde{R}_l \\ &= \widehat{D}^\dagger_{l+1}\left(\widehat{D}_{l+1}\widehat{D}^\dagger_{l+1} - \frac{\kappa^2}{4(l+1)^2}\right)\widetilde{R}_l = \widehat{D}^\dagger_{l+1}\underbrace{\widehat{H}_l\widetilde{R}_l}_{\epsilon\widetilde{R}_l} = \epsilon\widehat{D}^\dagger_{l+1}\widetilde{R}_l.\end{aligned}$$

□

固有エネルギー・固有波動関数

量子数に対する制約

一つの固有エネルギー ϵ に対し，許される方位量子数 l は有限個に限られる．

【証明】波動関数空間の内積・ノルムを次で導入する．

$$(\widetilde{R}, \widetilde{S}) := \int_0^\infty \mathrm{d}r\, \widetilde{R}(r)^* \widetilde{S}(r), \quad \|\widetilde{R}\| := \sqrt{(\widetilde{R}, \widetilde{R})}.$$

$\widetilde{R}_l(r)$ を固有エネルギー ϵ，方位量子数 l の固有波動関数とすると，

$$\begin{aligned}
0 \le \|\widehat{D}_l \widetilde{R}_l\|^2 &= (\widetilde{R}_l, \widehat{D}_l^\dagger \widehat{D}_l \widetilde{R}_l) \\
&= \left(\widetilde{R}_l, \left(\widehat{H}_l + \frac{\kappa^2}{4l^2}\right)\widetilde{R}_l\right) = \left(\frac{\kappa^2}{4l^2} - |\epsilon|\right)\|\widetilde{R}_l\|^2, \\
\therefore \quad l &\le \frac{\kappa}{2\sqrt{|\epsilon|}}.
\end{aligned}$$

□

【注意】束縛状態では，一つのエネルギー固有値に対する縮退度は有限である．

固有エネルギー・固有波動関数

注意

$\widehat{D}_l^\dagger$ は $\widehat{D}_l$ の共役演算子である．

$$(\widehat{D}_l^\dagger \widetilde{\varphi}, \widetilde{\psi}) = (\widetilde{\varphi}, \widehat{D}_l \widetilde{\psi}).$$

【証明】

$$(\widehat{D}_l^\dagger \widetilde{\varphi}, \widetilde{\psi}) = \int_0^\infty \mathrm{d}r \left(-\frac{\mathrm{d}\widetilde{\varphi}^*}{\mathrm{d}r} + \frac{l(l+1)}{r^2}\widetilde{\varphi}^* - \frac{\kappa}{2l}\widetilde{\varphi}^* \right) \widetilde{\psi}$$

（部分積分により）

$$= \underbrace{\left[-\widetilde{\varphi}^* \widetilde{\psi} \right]_{r=0}^{\infty}}_{0} + \int_0^\infty \mathrm{d}r \left(\widetilde{\varphi}^* \frac{\mathrm{d}\widetilde{\psi}}{\mathrm{d}r} + \frac{l(l+1)}{r^2}\widetilde{\varphi}^* \widetilde{\psi} - \frac{\kappa}{2l}\widetilde{\varphi}^* \widetilde{\psi} \right)$$

$$= (\widetilde{\varphi}, \widehat{D}_l \widetilde{\psi}).$$

ここで，

$$\widetilde{\varphi}(r) = r\varphi(r), \quad \widetilde{\psi}(r) = r\psi(r), \quad \varphi(r), \psi(r) \text{ は } r \to 0 \text{ で有限}$$

より，$\widetilde{\varphi}(r), \widetilde{\psi}(r) \to 0$ ($r \to 0$) であることに注意． □

固有エネルギー・固有波動関数

固有エネルギー ϵ に対し許される方位量子数 l の最大値を $n-1$ と記せば，方位量子数 n の固有状態は存在しないので，

$$\widehat{D}_n^\dagger \widetilde{R}_{n-1}(r) = 0.$$

上昇演算子の定義から

$$\widehat{D}_n^\dagger \widetilde{R}_{n-1}(r) = -r^n \exp\left(-\frac{\kappa}{2n} r\right) \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r} \left[r^{-n} \exp\left(\frac{\kappa}{2n} r\right) \widetilde{R}_{n-1}(r) \right] = 0,$$

$$\widetilde{R}_{n-1}(r) = C r^n \exp\left(-\frac{\kappa}{2n} r\right) \quad (\, C \text{ const.}\,)\,.$$

固有エネルギー・固有波動関数

固有エネルギー ϵ に対し許される方位量子数 l の最大値を $n-1$ と記せば，
方位量子数 n の固有状態は存在しないので，

$$\widehat{D}_n^\dagger \widetilde{R}_{n-1}(r) = 0.$$

上昇演算子の定義から

$$\widehat{D}_n^\dagger \widetilde{R}_{n-1}(r) = -r^n \exp\left(-\frac{\kappa}{2n}r\right) \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\left[r^{-n} \exp\left(\frac{\kappa}{2n}r\right) \widetilde{R}_{n-1}(r)\right] = 0,$$

$$\widetilde{R}_{n-1}(r) = Cr^n \exp\left(-\frac{\kappa}{2n}r\right) \quad (\, C \text{ const.}\,)\,.$$

固有エネルギー ϵ は n で表される．

$$\epsilon\widetilde{R}_{n-1}(r) = \widehat{H}_{n-1}\widetilde{R}_{n-1}(r) = \left(\widehat{D}_n\widehat{D}_n^\dagger - \frac{\kappa^2}{4n^2}\right)\widetilde{R}_{n-1}(r) = -\frac{\kappa^2}{4n^2}\widetilde{R}_{n-1}(r).$$

固有エネルギー・固有波動関数

固有エネルギー ϵ に対し許される方位量子数 l の最大値を $n-1$ と記せば，方位量子数 n の固有状態は存在しないので，

$$\widehat{D}_n^\dagger \widetilde{R}_{n-1}(r) = 0.$$

上昇演算子の定義から

$$\widehat{D}_n^\dagger \widetilde{R}_{n-1}(r) = -r^n \exp\left(-\frac{\kappa}{2n}r\right) \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\left[r^{-n} \exp\left(\frac{\kappa}{2n}r\right) \widetilde{R}_{n-1}(r)\right] = 0,$$

$$\widetilde{R}_{n-1}(r) = C r^n \exp\left(-\frac{\kappa}{2n}r\right) \quad (\,C \text{ const.}\,).$$

固有エネルギー ϵ は n で表される．

$$\epsilon \widetilde{R}_{n-1}(r) = \widehat{H}_{n-1}\widetilde{R}_{n-1}(r) = \left(\widehat{D}_n \widehat{D}_n^\dagger - \frac{\kappa^2}{4n^2}\right)\widetilde{R}_{n-1}(r) = -\frac{\kappa^2}{4n^2}\widetilde{R}_{n-1}(r).$$

水素原子のエネルギースペクトル

$$\epsilon = \epsilon_n = -\frac{\kappa^2}{4n^2}, \quad \text{i.e.,} \quad E = E_n = -\frac{m_e \kappa_0^2}{2\hbar^2}\frac{1}{n^2} \quad (\,n = 1, 2, \ldots\,).$$

固有エネルギー・固有波動関数

一般の固有関数（$\widetilde{R}_{n-1}$ から生成される）

$\widetilde{R}_{n-1}(r)$ に下降演算子を作用させていけば，方位量子数 $l = n-2, n-3, \ldots$ の固有波動関数が得られる．

そして，これらの固有エネルギーはすべて $\widetilde{R}_{n-1}(r)$ と同じ $\epsilon_n = -\dfrac{\kappa^2}{4n^2}$ である．

- 方位量子数 $n-1$：$\widetilde{R}_{n-1}(r)$.
- 方位量子数 $n-2$：$\widehat{D}_{n-1}\widetilde{R}_{n-1}(r)$.
- 方位量子数 $n-3$：$\widehat{D}_{n-2}\widehat{D}_{n-1}\widetilde{R}_{n-1}(r)$.
- $\ldots$
- 方位量子数 $l(=0,1,\ldots,n-1)$：$\widehat{D}_{l+1}\cdots\widehat{D}_{n-2}\widehat{D}_{n-1}\widetilde{R}_{n-1}(r)$.

固有エネルギー・固有波動関数

ここで，変数のスケール変換を行う．

$$x := \frac{\kappa}{n} r.$$

スケール変換後の昇降演算子，Hamiltonian はそれぞれ次のようになる．

$$\text{降下演算子} \quad \widehat{\mathscr{D}}_l := \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} + \frac{l}{x} - \frac{n}{2l} = \frac{n}{\kappa} \widehat{D}_l,$$

$$\text{上昇演算子} \quad \widehat{\mathscr{D}}_l^\dagger := -\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} + \frac{l}{x} - \frac{n}{2l} = \frac{n}{\kappa} \widehat{D}_l^\dagger.$$

$$\text{Hamiltonian} \quad \widehat{\mathscr{H}_l} := -\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + \frac{l(l+1)}{x^2} - \frac{n}{x} = \frac{n^2}{\kappa^2} \widehat{H}_l.$$

固有エネルギー・固有波動関数

固有波動関数 $\widetilde{R}_{n-1}(r)$ は変換後は次のようになる．

$$\psi_{n-1}(x) = \widetilde{R}_{n-1}\left(\frac{n}{\kappa}x\right) = \frac{1}{\sqrt{(2n)!}} x^n \mathrm{e}^{-x/2}.$$

係数 $1/\sqrt{(2n)!}$ は規格化条件 $\int_0^\infty \mathrm{d}x |\psi_{n-1}(x)|^2 = 1$ により定めた．
エネルギー固有値は $-1/4$ である．

$$\widehat{\mathscr{H}}_{n-1}\psi_{n-1} = -\frac{1}{4}\psi_{n-1}.$$

$\psi_{n-1}(x)$ に降下演算子を作用させれば方位量子数 $l = n-2, n-3, \ldots$ の固有波動関数が得られる．これらのエネルギー固有値はみな $-1/4$ である．

- 方位量子数 $n-2$：$\widehat{\mathscr{D}}_{n-1}\psi_{n-1}(x)$.
- 方位量子数 $n-3$：$\widehat{\mathscr{D}}_{n-2}\widehat{\mathscr{D}}_{n-1}\psi_{n-1}(x)$.
- $\ldots$
- 方位量子数 $l(=0, 1, \ldots, n-2)$：$\widehat{\mathscr{D}}_l \ldots \widehat{\mathscr{D}}_{n-1}\psi_{n-1}(x)$.

固有エネルギー・固有波動関数

一般の固有関数

$$\psi_l(x) = \text{const.} \times \widehat{\mathscr{D}}_l \cdots \widehat{\mathscr{D}}_{n-2} \widehat{\mathscr{D}}_{n-1} \psi_{n-1}(x),$$
$$\widehat{\mathscr{D}}_l = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} + \frac{l}{x} - \frac{n}{2l}$$
$$(\, l = 0, 1, \ldots, n-2 \,).$$

ここで右辺を変形すれば，固有関数に対するおなじみの Laguerre 陪多項式による表現が得られる．

固有エネルギー・固有波動関数

次のことが示される．

補題 1

$\lambda = 1, 2, \dots, n-1$ に対し，

$$
\begin{aligned}
&\widehat{\mathscr{D}}_{n-\lambda} \cdots \widehat{\mathscr{D}}_{n-2} \widehat{\mathscr{D}}_{n-1} \psi_{n-1}(x) \\
&= \frac{1}{\sqrt{(2n)!}} \frac{2n-1}{2(n-1)} \frac{2n-1}{2(n-2)} \cdots \frac{2n-\lambda}{2(n-\lambda)} x^{\lambda+1-n} \mathrm{e}^{x/2} \frac{\mathrm{d}^{\lambda}}{\mathrm{d}x^{\lambda}} (x^{2n+1-\lambda} \mathrm{e}^{-x}) \\
&= \frac{\lambda!}{\sqrt{(2n)!}} \frac{2n-1}{2(n-1)} \frac{2n-1}{2(n-2)} \cdots \frac{2n-\lambda}{2(n-\lambda)} x^{n-\lambda} \mathrm{e}^{-x/2} L_{\lambda}^{2n-2\lambda-1}(x),
\end{aligned}
$$

ここで $L_{\alpha}^{\beta}(x)$ は Laguerre 陪多項式である．

Laguerre 陪多項式

$$
L_{\alpha}^{\beta}(x) := \frac{1}{\alpha!} x^{-\beta} \mathrm{e}^{x} \frac{\mathrm{d}^{\alpha}}{\mathrm{d}x^{\alpha}} (x^{\alpha+\beta} \mathrm{e}^{-x}).
$$

∗ 証明はこのスライドの末尾の「補遺」に記します．

固有エネルギー・固有波動関数（波動関数の規格化）

方位量子数 l（固有エネルギー $-1/4$）の固有波動関数．

$$\psi_l(x) := C\widehat{\mathscr{D}}_{l+1}\cdots\widehat{\mathscr{D}}_{n-2}\widehat{\mathscr{D}}_{n-1}\psi_{n-1}(x) \quad (\, l = 0, 1, \ldots, n-1 \,).$$

係数 C は規格化条件 $\|\psi_l\|^2 = \int_0^\infty \mathrm{d}x|\psi_l(x)|^2 = 1$ を満たすように定める．

波動関数の規格化には次の補題を用いる．

補題 2

$$\psi_{l-1}(x) = \frac{2l}{\sqrt{(n-l)(n+l)}}\widehat{\mathscr{D}}_l\psi_l(x) \quad (\, l = 1, 2, \ldots, n-1 \,).$$

固有エネルギー・固有波動関数（波動関数の規格化）

補題 2

$$\psi_{l-1}(x) = \frac{2l}{\sqrt{(n-l)(n+l)}}\widehat{\mathscr{D}}_l\psi_l(x) \quad (\, l = 1, 2, \ldots, n-1 \,).$$

【証明】$\widehat{\mathscr{D}}_l\psi_l(x)$ は固有エネルギー $-1/4$，方位量子数 $l-1$ の固有関数であるから，次のように書ける．

$$\widehat{\mathscr{D}}_l\psi_l(x) = c\psi_{l-1}(x).$$

規格化条件 $\|\psi_l\| = 1$ から係数 c を定める．

$$\begin{aligned}
|c|^2 &= |c|^2\|\psi_{l-1}\|^2 = \|\widehat{\mathscr{D}}_l\psi_l\|^2 = (\psi_l, \widehat{\mathscr{D}}_l^\dagger\widehat{\mathscr{D}}_l\psi_l) \\
&= \left(\psi_l, \left(\widehat{\mathscr{H}_l} + \frac{n^2}{4l^2}\right)\psi_l\right) \\
&= \frac{1}{4}\left(\frac{n^2}{4l^2} - 1\right)\|\psi_l\|^2 = \frac{1}{4}\left(\frac{n^2}{4l^2} - 1\right), \\
\therefore \quad c &= \frac{1}{2}\sqrt{\frac{n^2}{l^2} - 1} = \frac{\sqrt{(n-l)(n+l)}}{2l}.
\end{aligned}$$

$\square$

固有エネルギー・固有波動関数（波動関数の規格化）

補題 2 と補題 1

$$
\begin{aligned}
&\widehat{\mathscr{D}}_{n-\lambda} \cdots \widehat{\mathscr{D}}_{n-2} \widehat{\mathscr{D}}_{n-1} \psi_{n-1}(x) \\
&\qquad = \frac{\lambda!}{\sqrt{(2n)!}} \frac{2n-1}{2(n-1)} \frac{2n-2}{2(n-2)} \cdots \frac{2n-\lambda}{2(n-\lambda)} x^{n-\lambda} \mathrm{e}^{-x/2} L_{\lambda}^{2n-2\lambda-1}(x)
\end{aligned}
$$

を用いて，

$$
\begin{aligned}
\psi_{n-2}(x) &= \frac{2(n-1)}{\sqrt{2n-1}} \widehat{\mathscr{D}}_{n-1} \psi_{n-1}(x) \\
&= \frac{2(n-1)}{\sqrt{2n-1}} \frac{1}{\sqrt{(2n)!}} \frac{2n-1}{2(n-1)} x^{n-1} \mathrm{e}^{-x/2} L_1^{2n-3}(x) \\
&= \frac{1}{\sqrt{2n(2n-2)!}} x^{n-1} \mathrm{e}^{-x/2} L_1^{2n-3}(x).
\end{aligned}
$$

固有エネルギー・固有波動関数（波動関数の規格化）

$$
\begin{aligned}
\psi_{n-3}(x) &= \frac{2(n-2)}{\sqrt{2n-2}} \widehat{\mathscr{D}}_{n-2} \psi_{n-2}(x) \\
&= \frac{2(n-2)}{\sqrt{2(2n-2)}} \frac{2(n-1)}{\sqrt{2n-1}} \widehat{\mathscr{D}}_{n-2} \widehat{\mathscr{D}}_{n-1} \psi_{n-1}(x) \\
&= \frac{2(n-2)}{\sqrt{2(2n-2)}} \frac{2(n-1)}{\sqrt{2n-1}} \frac{2!}{\sqrt{(2n)!}} \frac{2n-1}{2(n-1)} \frac{2n-2}{2(n-2)} x^{n-2} \mathrm{e}^{-x/2} L_2^{2n-5}(x) \\
&= \sqrt{\frac{2!}{2n(2n-3)!}} x^{n-2} \mathrm{e}^{-x/2} L_2^{2n-5}(x).
\end{aligned}
$$

以下同様にして，結局次を得る．

$$
\psi_l(x) = \sqrt{\frac{(n-l-1)!}{2n(n+l)!}} x^{l+1} \mathrm{e}^{-x/2} L_{n-l-1}^{2l+1}(x) \quad (\, l = 0, 1, 2, \ldots, n-1 \,).
$$

固有エネルギー・固有波動関数（波動関数の規格化）

変数を $r = (n/\kappa)x$ に戻す．

$$\widetilde{R}_{nl}(r) = C\psi_l\left(\frac{\kappa}{n}r\right),$$
$$R_{nl}(r) = \frac{1}{r}\widetilde{R}_{nl}(r) = \frac{C}{r}\psi_l\left(\frac{\kappa}{n}r\right).$$

規格化条件より係数 C を求める．
$\psi_l(x)$ は $\displaystyle\int_0^\infty \mathrm{d}x|\psi_l(x)|^2 = 1$ と規格化されていることに注意して，

$$1 = \int_0^\infty \mathrm{d}r\, r^2|R_{nl}(r)|^2 = |C|^2\int_0^\infty \mathrm{d}r\left|\psi_l\left(\frac{\kappa}{n}r\right)\right|^2 = |C|^2\frac{n}{\kappa},$$
$$\therefore \quad C = \sqrt{\frac{\kappa}{n}}.$$

固有エネルギー・固有波動関数（波動関数の規格化）

動径波動関数．

$$R_{nl}(r) = \left(\frac{\kappa}{n}\right)^{l+3/2} \sqrt{\frac{(n-l-1)!}{2n(n+l)!}} r^l \exp\left(-\frac{\kappa}{2n} r\right) L_{n-l-1}^{2l+1}\left(\frac{\kappa}{n} r\right).$$

固有エネルギー・固有波動関数（波動関数の規格化）

動径波動関数.

$$R_{nl}(r) = \left(\frac{\kappa}{n}\right)^{l+3/2} \sqrt{\frac{(n-l-1)!}{2n(n+l)!}} r^l \exp\left(-\frac{\kappa}{2n} r\right) L_{n-l-1}^{2l+1}\left(\frac{\kappa}{n} r\right).$$

水素原子の固有状態

エネルギー固有値.

$$E_n = -\frac{m_e \kappa_0^2}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2}.$$

固有波動関数

$$\Psi_{nlm}(r,\theta,\phi) = \left(\frac{\kappa}{n}\right)^{l+3/2} \sqrt{\frac{(n-l-1)!}{2n(n+l)!}} r^l \exp\left(-\frac{\kappa}{2n} r\right) L_{n-l-1}^{2l+1}\left(\frac{\kappa}{n} r\right) Y_{lm}(\theta,\phi),$$

$$\begin{aligned} n &= 1, 2, \ldots && \text{主量子数}, \\ l &= 0, 1, 2, \ldots, n-1 && \text{方位量子数}, \\ m &= 0, \pm 1, \pm 2, \ldots, \pm l && \text{磁気量子数}. \end{aligned}$$

固有エネルギー・固有波動関数（Laguerre 陪多項式）

今までの議論から，Laguerre 陪多項式に関する公式をひとつ得る．

$$\psi_l(x) = \sqrt{\frac{(n-l-1)!}{2n(n+l)!}} x^{l+1} \mathrm{e}^{-x/2} L_{n-l-1}^{2l+1}(x),$$

$$\int_0^\infty \mathrm{d}x |\psi_l(x)|^2 = 1$$

より，次の公式を得る．

$$\int_0^\infty \mathrm{d}x\, x^{\beta+1} \mathrm{e}^{-x} L_\alpha^\beta(x)^2 = \frac{(\alpha+\beta)!}{\alpha!}(2\alpha+\beta+1).$$

【注意】これは Laguerre 陪多項式の直交関係式ではない．

直交関係式．

$$\int_0^\infty \mathrm{d}x\, x^{\beta} \mathrm{e}^{-x} L_\alpha^\beta(x) L_{\alpha'}^\beta(x) = \frac{(\alpha+\beta)!}{\alpha!}\delta_{\alpha\alpha'}.$$

Contents

まとめ

- 量子力学 Schrödinger 方程式に対する演算子法．
  - 昇降演算子．
  - 一次元調和振動子 $\sim$ 水素原子．
- （古典力学）運動方程式が解ける $\leftrightarrow$ 対称性 $=$ 保存量の存在（幾何学）．
  （井上）水素原子（Kepler 問題）の対称性，幾何学．
- （佐々木）昇降演算子による量子力学の演算子法の一般化．

【参考文献】

- 伊藤祐斗，水素原子に潜む数理構造　分子科学への応用を見据えて，
  2019 年分子科学若手の会夏の学校第二分科会（2019 年 8 月 19 日 ∼8 月 23 日）．
  （ネットで検索すれば PDF が入手できる）
- 佐々木隆，可解な量子力学系の数理物理　直交多項式の生み出す多様な展開，
  サイエンス社 SGC ライブラリ 122，2016 年．

まとめ

- 量子力学 Schrödinger 方程式に対する演算子法．
  - 昇降演算子．
  - 一次元調和振動子 $\sim$ 水素原子．
- （古典力学）運動方程式が解ける $\leftrightarrow$ 対称性 $=$ 保存量の存在（幾何学）．
  （井上）水素原子（Kepler 問題）の対称性，幾何学．
- （佐々木）昇降演算子による量子力学の演算子法の一般化．

【参考文献】

- 伊藤祐斗，水素原子に潜む数理構造　分子科学への応用を見据えて，
  2019 年分子科学若手の会夏の学校第二分科会（2019 年 8 月 19 日 ~8 月 23 日）．
  （ネットで検索すれば PDF が入手できる）
- 佐々木隆，可解な量子力学系の数理物理　直交多項式の生み出す多様な展開，
  サイエンス社 SGC ライブラリ 122，2016 年．

Thank you!

補遺：補題 1 の証明

補題 1

$\lambda = 1, 2, \ldots, n-1$ に対し

$$\widehat{\mathscr{D}}_{n-\lambda} \cdots \widehat{\mathscr{D}}_{n-2} \widehat{\mathscr{D}}_{n-1} \psi_{n-1}(x) = \frac{1}{\sqrt{(2n)!}} \frac{2n-1}{2(n-1)} \frac{2n-3}{2(n-2)} \cdots \frac{2n-\lambda}{2(n-\lambda)} x^{\lambda+1-n} \mathrm{e}^{x/2} \frac{\mathrm{d}^{\lambda}}{\mathrm{d}x^{\lambda}} (x^{2n-1-\lambda} \mathrm{e}^{-x}).$$

【証明】はじめに $\lambda = 1, 2, 3$ あたりで確認して，どういう感じで補題が示されるか，感覚をつかむと良い．

λ についての数学的帰納法で証明する．

$\lambda = 1$ の場合は直接計算により証明される．$\lambda - 1$ の場合に成り立つと仮定する．

$$\widehat{\mathscr{D}}_{n-\lambda+1} \cdots \widehat{\mathscr{D}}_{n-2} \widehat{\mathscr{D}}_{n-1} \psi_{n-1}(x) = \frac{1}{\sqrt{(2n)!}} \frac{2n-1}{2(n-1)} \frac{2n-3}{2(n-2)} \cdots \frac{2n-\lambda+1}{2(n-\lambda+1)} x^{\lambda-n} \mathrm{e}^{x/2} \frac{\mathrm{d}^{\lambda-1}}{\mathrm{d}x^{\lambda-1}} (x^{2n-\lambda} \mathrm{e}^{-x}).$$

補遺：補題 1 の証明

下降演算子 $\widehat{\mathscr{D}}_{n-\lambda}$ の定義より，

$$
\begin{aligned}
&\widehat{\mathscr{D}}_{n-\lambda}\cdots\widehat{\mathscr{D}}_{n-2}\widehat{\mathscr{D}}_{n-1}\psi_{n-1}(x)\\
&=\frac{1}{\sqrt{(2n)!}}\frac{2n-1}{2(n-1)}\frac{2n-3}{2(n-2)}\cdots\frac{2n-\lambda+1}{2(n-\lambda+1)}x^{\lambda-n}\exp\left(\frac{nx}{2(n-\lambda)}\right)\\
&\quad\times\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left[x^{n-\lambda}\exp\left(-\frac{nx}{2(n-\lambda)}\right)\cdot x^{\lambda-n}\mathrm{e}^{x/2}\frac{\mathrm{d}^{\lambda-1}}{\mathrm{d}x^{\lambda-1}}(x^{2n-\lambda}\mathrm{e}^{-x})\right]\\
&=\frac{1}{\sqrt{(2n)!}}\frac{2n-1}{2(n-1)}\frac{2n-3}{2(n-2)}\cdots\frac{2n-\lambda+1}{2(n-\lambda+1)}x^{\lambda-n}\exp\left(\frac{nx}{2(n-\lambda)}\right)\\
&\quad\times\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left[\exp\left(-\frac{\lambda x}{2(n-\lambda)}\right)\frac{\mathrm{d}^{\lambda-1}}{\mathrm{d}x^{\lambda-1}}(x^{2n-\lambda}\mathrm{e}^{-x})\right]\\
&=\frac{1}{\sqrt{(2n)!}}\frac{2n-1}{2(n-1)}\frac{2n-3}{2(n-2)}\cdots\frac{2n-\lambda+1}{2(n-\lambda+1)}x^{\lambda-n}\exp\left(\frac{nx}{2(n-\lambda)}\right)\\
&\quad\times\exp\left(-\frac{\lambda x}{2(n-\lambda)}\right)\underbrace{\left[\frac{\mathrm{d}^{\lambda}}{\mathrm{d}x^{\lambda}}(x^{2n-\lambda}\mathrm{e}^{-x})-\frac{\lambda}{2(n-\lambda)}\frac{\mathrm{d}^{\lambda-1}}{\mathrm{d}x^{\lambda-1}}(x^{2n-\lambda}\mathrm{e}^{-x})\right]}_{(1)},
\end{aligned}
$$

補遺：補題 1 の証明

$$
\begin{aligned}
(1) &= \frac{\mathrm{d}^\lambda}{\mathrm{d}x^\lambda}(x \cdot x^{2n-1-\lambda}\mathrm{e}^{-x}) - \frac{\lambda}{2(n-\lambda)}\frac{\mathrm{d}^{\lambda-1}}{\mathrm{d}x^{\lambda-1}}(x^{2n-\lambda}\mathrm{e}^{-x}) \\
&= x\frac{\mathrm{d}^\lambda}{\mathrm{d}x^\lambda}(x^{2n-1-\lambda}\mathrm{e}^{-x}) + \lambda\frac{\mathrm{d}^{\lambda-1}}{\mathrm{d}x^{\lambda-1}}(x^{2n-1-\lambda}\mathrm{e}^{-x}) - \frac{\lambda}{2(n-\lambda)}\frac{\mathrm{d}^{\lambda-1}}{\mathrm{d}x^{\lambda-1}}(x^{2n-\lambda}\mathrm{e}^{-x}) \\
&= x\frac{\mathrm{d}^\lambda}{\mathrm{d}x^\lambda}(x^{2n-1-\lambda}\mathrm{e}^{-x}) + \lambda\mathrm{e}^{-x}\sum_{k=0}^{\lambda-1}(-1)^k\frac{(\lambda-1)!}{k!(\lambda-1-k)!}\frac{(2n-1-\lambda)!}{(2n-2\lambda+k)!}x^{2n-2\lambda+k} \\
&\quad - \frac{\lambda\mathrm{e}^{-x}}{2(n-\lambda)}\sum_{k=0}^{\lambda-1}(-1)^k\frac{(\lambda-1)!}{k!(\lambda-1-k)!}\frac{(2n-\lambda)!}{(2n-2\lambda+1+k)!}x^{2n-2\lambda+1+k} \\
&= x\frac{\mathrm{d}^\lambda}{\mathrm{d}x^\lambda}(x^{2n-1-\lambda}) + \frac{\lambda(2n-1-\lambda)!}{(2n-2\lambda)!}\mathrm{e}^{-x}x^{2n-2\lambda} \\
&\quad + \lambda!(2n-1-\lambda)!\mathrm{e}^{-x}\sum_{k=1}^{\lambda-1}(-1)^k\frac{x^{2n-2\lambda+k}}{k!(\lambda-1-k)!(2n-2\lambda-k)!} \\
&\quad + \frac{\lambda!(2n-\lambda)!\mathrm{e}^{-x}}{2(n-\lambda)}\sum_{k=1}^{\lambda}(-1)^k\frac{x^{2n-2\lambda+k}}{(k-1)!(\lambda-k)!(2n-2\lambda+k)!}
\end{aligned}
$$

補遺：補題 1 の証明

$$
\begin{aligned}
&= x\frac{\mathrm{d}^\lambda}{\mathrm{d}x^\lambda}(x^{2n-1-\lambda}\mathrm{e}^{-x}) + \frac{\lambda(2n-1-\lambda)!}{(2n-2\lambda)!}\mathrm{e}^{-x}x^{2n-2\lambda} \\
&\quad + \frac{\lambda!(2n-1-\lambda)!}{2(n-\lambda)}\mathrm{e}^{-x}\sum_{k=1}^{\lambda-1}(-1)^k \underbrace{[2(n-\lambda)(\lambda-k)+(2n-\lambda)k]}_{\lambda(2n-2\lambda+k)} \\
&\qquad\qquad \times \frac{x^{2n-2\lambda+k}}{k!(\lambda-k)!(2n-2\lambda+k)!} + (-1)^\lambda \frac{\lambda}{2(n-\lambda)}x^{2n-\lambda}\mathrm{e}^{-x} \\
&= x\frac{\mathrm{d}^\lambda}{\mathrm{d}x^\lambda}(x^{2n-1-\lambda}\mathrm{e}^{-x}) \\
&\quad + \frac{\lambda}{2(n-\lambda)}x\underbrace{\mathrm{e}^{-x}\sum_{k=0}^{\lambda}(-1)^k\frac{\lambda!}{k!(\lambda-k)!}\frac{(2n-1-\lambda)!}{(2n-1-2\lambda+k)!}x^{2n-1-2\lambda+k}}_{\frac{\mathrm{d}^\lambda}{\mathrm{d}x^\lambda}(x^{2n-1-\lambda}\mathrm{e}^{-x})} \\
&= \frac{2n-\lambda}{2(n-\lambda)}x\frac{\mathrm{d}^\lambda}{\mathrm{d}x^\lambda}(x^{2n-1-\lambda}\mathrm{e}^{-x}).
\end{aligned}
$$

補遺：補題 1 の証明

$$\therefore \quad \widehat{\mathscr{D}}_{n-\lambda} \cdots \widehat{\mathscr{D}}_{n-2} \widehat{\mathscr{D}}_{n-1} \psi_{n-1}(x)$$
$$= \frac{1}{\sqrt{(2n)!}} \frac{2n-1}{2(n-1)} \frac{2n-2}{2(n-2)} \cdots \frac{2n-\lambda}{2(n-\lambda)} x^{\lambda+1-n} \frac{\mathrm{d}^\lambda}{\mathrm{d}x^\lambda} (x^{2n-1-\lambda} \mathrm{e}^{-x}).$$

ゆえに，λ の場合も題意の等式が成立する． □