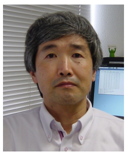
解ける量子力学模型と直交多項式



小竹悟

信州大学学術研究院理工学域
理学系

odake@azusa.shinshu-u.ac.jp

調和振動子の量子力学ではエルミート多項式，水素原子の量子力学ではラゲール多項式という具合に，直交多項式は量子力学の問題を扱う際に頻繁に現れる欠かせない存在である．これら直交多項式は数学者によって詳しく調べられてきた．物理学にとって大切な 2 階微分方程式を満たす直交多項式はエルミート，ラゲール，ヤコビ多項式に限られる事が古くから知られており，2 階差分方程式を満たす直交多項式も (q-) 超幾何直交多項式のアスキースキームとして 1980 年代にまとめられている．この様に書くともう何も研究する事が無い様に思われるかもしれないが，中々どうして最近もまだ進展があり，その内の 2 つ，生成消滅演算子の自然な構成と，新しい種類の直交多項式について解説する．この発見の原動力となったのが解ける量子力学模型によるアプローチで，その利点は量子力学の研究で培われた知識・手法を用いる事ができる点である．また，直交多項式の性質に統一的な視点を与える事もできた．例えば，アスキースキームの直交多項式が満たしている前方・後方ずらし関係式は個別に述べられているだけであったが，量子力学の観点からは模型の形状不変性の帰結として統一的に理解できる．

解ける量子力学模型の生成消滅演算子に関する研究は色々と行われてきたが，それらは具体的な微分演算子としてではなく形式的な演算子に過ぎなかった．前方・後方ずらし関係式はパラメータをずらしてしまうので，調和振動子以外では生成消滅演算子とは別物である．調和振動子の生成消滅演算子が座標のハイゼンベルク解の負・正振動数部分の係数として得られていたのを真似て，アスキースキームの直交多項式が固有関数に現れる量子力学模型に対して生成消滅演算子を微分演算子 (差分演算子) として自然な形で構成する事が 2006 年にできた．これには，閉関係式と名付けられた性質を用いて，正弦的座標と呼ばれる特別な座標のハイゼンベルク解が厳密に求められる事が利用された．

通常の直交多項式は全ての次数が揃っている事から完全系をなしているが，次数に欠落があるにも拘らず完全系をなしているものが新しい種類の直交多項式である．2 階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，ヤコビ多項式に限られるという定理を逃れる試みとして，微分方程式を差分方程式に変更する事でアスキースキームの直交多項式が得られていたが，多項式の次数を見直すという新しい方向への変更である．0 次式が存在せず 1 次式から始まるが完全系をなす最初の例が 2008 年に与えられ，例外直交多項式と名付けられた．新しい種類の直交多項式を固有関数として持つ解ける量子力学模型を形状不変性や他の手法を用いて構成する事により，新しい種類の直交多項式が無限に多く得られ，多添字直交多項式と名付けられた．この新しい種類の直交多項式の発見は，多少大げさかも知れないが，エルミート・ラゲール・ヤコビ以来の大きな進展と言えよう．差分方程式を満たす直交多項式に対しても多添字直交多項式を構成する事ができ，これらの構成において量子力学的定式化がおおいに役立った．直交多項式に新たな分野を切り開いたこれらの新しい多項式は現在活発に研究が行われている．

1. はじめに

大学の量子力学の授業では調和振動子や水素原子が扱われ，そこにはエルミート多項式，ラゲール多項式，ルジャンドル多項式 (ヤコビ多項式の特別な場合) といった直交多項式が現れた．これらの系は物理的に重要なだけではなく，シュレディンガー方程式が厳密に解けるという点でも意味がある．解ける模型というものは不思議と色々な場面で顔を出してくるもので，それについて丁寧に調べておく事は後々のために大切と考えられるが，1 次元でしかも 1 自由度の解ける量子力学など今更研究する事があるのかと思われるのではないだろうか．これらの直交多項式は百数十年前には知られていたし，量子力学も誕生以来 90 年程経過して様々な観点から調べられ，解ける模型の色々なレビューも出ている事からも，大した発展はもはやないだろうと私も思っていた．更に，2 階微分方程式を満たす直交多項式はエルミート，ラゲール，ヤコビ多項式に限られるという定理も存在しているので尚更である．それが何故この様な研究をするに到ったかを少し述べておく．

私は物理学を対称性の立場から捉えようと思い，2 次元時空の共形場理論やその変形版を統制している無限次元対称性を調べていたが，(1) ビラソロ代数や W 代数及びその変形版 (無限次元代数)，(2) カロジェロ・サザーランド模型及びその変形版であるルイセナース・シュナイダー模型 (1 次元の解ける量子多体系)，(3) ジャック多項式及びその変形版であるマクドナルド多項式 (多変数の直交多項式)，という三者の興味深い関係が見い出された．佐々木隆氏と共にこのルイセナース・シュナイダー模型をもう少し調べて見ると，古典多体系の平衡点と量子 1 体系の固有関数の間の不思議な対応関係が存在していた．ルイセナース・シュナイダー模型のシュレディンガー方程式は (解析的) 差分方程式なので，これならば最も簡単な 1 自由度の場合を考えてもまだ研究する事はありそうである．という訳で，シュレディンガー方程式が差分方程式となっている量子系 (の内で更に特別な形をしたハミルトニアンを持つ系) を “離散量子力学” と名付けて，佐々木氏との共同研究が本格化した．

離散量子力学系は通常の量子力学系と同様の性質を持っており，研究を進めるうちに通常の量子力学系に対しても新しい知見が得られてきた．本解説では，解ける量子力学模型の観点から，生成消滅演算子の自然な構成法と，新しい種類の直交多項式を紹介する．通常の量子力学系と離散量子力学系で話は並行に進むのだが，話を分かり易くするために前者を例に取って説明していく．

2. 1 次元 1 自由度量子力学系の基本的性質

先ずは 1 次元 1 自由度の量子力学系の基本的な性質のおさらいから始めよう．座標を x，運動量を p，滑らかなポテンシャルを $U(x)$，ハミルトニアン $\mathcal{H}$ を

$$\mathcal{H} = p^2 + U(x), \quad p = -i\frac{d}{dx}, \quad x_1 < x < x_2, \qquad (1)$$

とし[1]，固有状態 $\phi_n(x)$ ($\|\phi_n\| < \infty$)

$$\mathcal{H}\phi_n(x) = \mathcal{E}_n\phi_n(x) \quad (n = 0, 1, \ldots), \qquad (2)$$

を考える．ポテンシャルの定数項を調整して，基底状態 $\phi_0(x)$ のエネルギー固有値が $\mathcal{E}_0 = 0$ となる様にしておく．内積は $(f, g) = \int_{x_1}^{x_2} dx f(x)^* g(x)$ で，規格化定数を $(\phi_n, \phi_m) = h_n\delta_{nm}$ ($0 < h_n < \infty$) とする．この時間に依らないシュレディンガー方程式は 2 階微分方程式であり，ポテンシャルの境界条件としては粒子が (x_1, x_2) から滲み出さないものを取り，固有状態の境界条件としてはハミルトニアンがエルミートになる様なものを課しておく (周期的境界条件を課した模型は S^1 コンパクト化を考える際などに現れるが，ここでは考えない)．$\phi_n(x)$ は実に取っておく．モースポテンシャル等の固有状態が有限個の系もあるが，以下では特に断らない限り固有状態が無限個存在する系を考える．

2.1. スツルム・リュービルの定理

2 階微分方程式の境界値問題に対するスツルム・リュービルの定理[1) を，今考えているシュレディンガー方程式に対して述べると，

(a) 離散固有値で縮退無し：$0 = \mathcal{E}_0 < \mathcal{E}_1 < \mathcal{E}_2 < \cdots$.

(b) $\phi_n(x)$ は $x_1 < x < x_2$ にちょうど n 個の零点を持ち，
 $\phi_n(x)$ の相隣合う零点の間に $\phi_{n-1}(x)$ の零点がある．

(c) 固有関数 $\phi_n(x)$ 達は直交関数系 $(\phi_n, \phi_m) = h_n\delta_{nm}$
 ($0 < h_n < \infty$) であり，ヒルベルト空間の完全系をなす．

となる．完全系というのは，ヒルベルト空間に属する関数 $f(x)$ に対して，$\phi_n(x)$ の適当な線型結合 $F(x) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n\phi_n(x)$ を取れば，f と F の差のノルムが 0 になるという事である．(b) は振動定理として知られている．

スツルム・リュービルの定理は固有関数の存在を保証してくれる存在定理であり，具体的に固有関数を求められるかについては何も教えてくれない．

2.2. 解ける模型

本解説で述べる解ける模型というのは，固有関数及びエネルギー固有値が全て具体的に求まる模型の事である．典型的な例として，調和振動子，動径振動子 (radial oscillator)，ダルブー・ポッシェル・テラー (Darboux-Pöshcl-Teller, 以下 DPT と略記) 模型がある．これらの系の固有関数は

$$\phi_n(x) = \phi_0(x)P_n\bigl(\eta(x)\bigr), \qquad (3)$$

[1] 式を簡単にするため，通常の規格化 $\mathcal{H} = \frac{1}{2m}p^2 + \cdots$ に対して，$\hbar$, m 等を 1 に取り，$2\mathcal{H}$ を改めて $\mathcal{H}$ とした．

という形をしている．ここで $\eta(x)$ は x のある関数で (§3.1 参照)，$P_n(\eta)$ は η の n 次式である．各模型のデータは，

(i) 調和振動子： $-\infty < x < \infty$,

$$\begin{aligned} &U(x) = x^2 - 1, \quad \mathcal{E}_n = 2n, \quad \eta(x) = x, \\ &\phi_0(x) = e^{-\frac{1}{2}x^2}, \quad P_n(\eta) = H_n(\eta), \end{aligned} \tag{4}$$

(ii) 動径振動子： $0 < x < \infty$,

$$\begin{aligned} &U(x) = x^2 + \frac{g(g-1)}{x^2} - 2g - 1, \quad g > 1, \\ &\mathcal{E}_n = 4n, \quad \eta(x) = x^2, \\ &\phi_0(x) = e^{-\frac{1}{2}x^2}x^g, \quad P_n(\eta) = L_n^{(g-\frac{1}{2})}(\eta), \end{aligned} \tag{5}$$

(iii) DPT 模型： $0 < x < \frac{\pi}{2}$,

$$\begin{aligned} &U(x) = \frac{g(g-1)}{\sin^2 x} + \frac{h(h-1)}{\cos^2 x} - (g+h)^2, \quad g,h > 1, \\ &\mathcal{E}_n = 4n(n+g+h), \quad \eta(x) = \cos 2x, \\ &\phi_0(x) = (\sin x)^g (\cos x)^h, \quad P_n(\eta) = P_n^{(g-\frac{1}{2},h-\frac{1}{2})}(\eta), \end{aligned} \tag{6}$$

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

これらの模型が上手く解けている理由は §3 で説明する．新しい解ける模型を得る方法としては，(あ) 既に解を知っている微分方程式に帰着させる，(い) §3 で説明する条件を満たす模型を探す，(う) 既知の解ける模型を変形する，などが考えられる．(う) の方法の一つとしてダルブー変換について次に紹介する．

2.3. クラムの定理とダルブー変換

ハミルトニアン $\mathcal{H}$ の系に対して "等スペクトル" の付随系を与えるクラム (Crum) の定理[2] を先ず紹介する．基底状態 $\phi_0(x)$ には (x の物理的領域 (x_1, x_2) において) 零点が無く定符号なので，$|\phi_0(x)| = e^{w(x)}$ とおく事ができる．この時ポテンシャルは $U(x) = (\partial_x w(x))^2 + \partial_x^2 w(x)$ と書き表され ($w(x)$ はプレポテンシャルと呼ばれる)，ハミルトニアン (1) は因子化

$$\mathcal{H} = \mathcal{A}^\dagger \mathcal{A}, \quad \mathcal{A} = \frac{d}{dx} - \partial_x w(x), \quad \mathcal{A}^\dagger = -\frac{d}{dx} - \partial_x w(x), \tag{7}$$

される．基底状態は $\mathcal{A}\phi_0(x) = 0$ で特徴付けられる．このハミルトニアンに対して，新しいハミルトニアン

$$\mathcal{H}^{[1]} \stackrel{\text{def}}{=} \mathcal{A}\mathcal{A}^\dagger, \quad \phi_n^{[1]}(x) \stackrel{\text{def}}{=} \mathcal{A}\phi_n(x) \quad (n \geq 1), \tag{8}$$

を考える．すると，容易に分かる様に，

$$\mathcal{H}^{[1]}\phi_n^{[1]} = \mathcal{A}\mathcal{A}^\dagger\mathcal{A}\phi_n = \mathcal{A}\mathcal{H}\phi_n = \mathcal{A}\mathcal{E}_n\phi_n = \mathcal{E}_n\phi_n^{[1]},$$

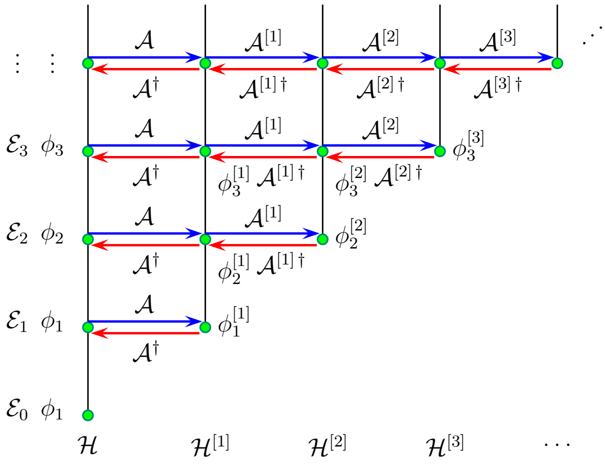


図 1: クラムの定理の模式図

となる．$\phi_n^{[1]}$ の 2 乗可積分性を示す事ができるので，$\phi_n^{[1]}$ は $\mathcal{H}^{[1]}$ の固有状態であり，その固有値は ϕ_n と同じ $\mathcal{E}_n$ である．また，振動定理を導く際の議論を用いて，$\phi_n^{[1]}(x)$ が (x_1, x_2) に $n-1$ 個の零点を持つ事を示す事ができるので，$\phi_n^{[1]}(x)$ 達が完全系を張る．よって，新しい $\mathcal{H}^{[1]}$ の系は，元の $\mathcal{H}$ の系に対して，$\mathcal{E}_0$ の状態を除いて等スペクトルとなっている．$\phi_n^{[1]}(x)$ の規格化定数は $(\phi_n^{[1]}, \phi_m^{[1]}) = (\mathcal{A}\phi_n, \mathcal{A}\phi_m) = (\mathcal{A}^\dagger\mathcal{A}\phi_n, \phi_m) = (\mathcal{H}\phi_n, \phi_m) = \mathcal{E}_n(\phi_n, \phi_m) = \mathcal{E}_n h_n \delta_{nm}$ となる．(8) の逆の対応は $\phi_n(x) = \frac{1}{\mathcal{E}_n}\mathcal{A}^\dagger\phi_n^{[1]}(x)$ である．この新しい系の基底状態 $\phi_1^{[1]}(x)$ は零点が無く定符号なので，$|\phi_1^{[1]}(x)| = e^{w^{[1]}(x)}$ とおくと

$$\mathcal{H}^{[1]} = \mathcal{A}^{[1]\dagger}\mathcal{A}^{[1]} + \mathcal{E}_1, \quad \mathcal{A}^{[1]} = \frac{d}{dx} - \partial_x w^{[1]}(x),$$

と書き直される．上の手順に従って新しい $\mathcal{H}^{[2]}$ を

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

と定義すると，$\phi_n^{[2]}$ は $\mathcal{H}^{[2]}$ の固有状態となり，元の系と $\mathcal{E}_0$, $\mathcal{E}_1$ の状態を除いて等スペクトルとなる．これを M ステップ繰り返すと，元の系に対して，$\mathcal{E}_0, \ldots, \mathcal{E}_{M-1}$ の M 個の状態を除いて等スペクトルな系が得られる (図 1 参照)：

$$\mathcal{H}^{[M]}\phi_n^{[M]}(x) = \mathcal{E}_n\phi_n^{[M]}(x) \quad (n = M, M+1, \ldots).$$

規格化定数は $(\phi_n^{[M]}, \phi_m^{[M]}) = \prod_{j=0}^{M-1}(\mathcal{E}_n - \mathcal{E}_j) \cdot h_n\delta_{nm}$ で与えられる．各ステップで固有関数は

$$\begin{aligned} \phi_n^{[s]}(x) &\stackrel{\text{def}}{=} \mathcal{A}^{[s-1]}\phi_n^{[s-1]}(x) \quad (n \geq s \geq 1), \\ \phi_n^{[s-1]}(x) &= \frac{\mathcal{A}^{[s-1]\dagger}}{\mathcal{E}_n - \mathcal{E}_{s-1}}\phi_n^{[s]}(x), \end{aligned}$$

という関係にあるので，後者を繰り返して使うと

$$\phi_n(x) = \frac{\mathcal{A}^{[0]\dagger}}{\mathcal{E}_n - \mathcal{E}_0}\frac{\mathcal{A}^{[1]\dagger}}{\mathcal{E}_n - \mathcal{E}_1}\cdots\frac{\mathcal{A}^{[n-1]\dagger}}{\mathcal{E}_n - \mathcal{E}_{n-1}}\phi_n^{[n]}(x), \tag{9}$$

なる表式が得られる事に注意しておく．

固有関数 $\phi_n^{[M]}(x)$ 及びポテンシャル $U^{[M]}(x)$ ($\mathcal{H}^{[M]}=p^2+U^{[M]}(x)$) は，ロンスキアンを用いると綺麗な形にまとめられる：

$$\phi_n^{[M]}(x)=\frac{\mathrm{W}[\phi_0,\phi_1,\ldots,\phi_{M-1},\phi_n](x)}{\mathrm{W}[\phi_0,\phi_1,\ldots,\phi_{M-1}](x)}, \tag{10}$$

$$U^{[M]}(x)=U(x)-2\partial_x^2\log\bigl|\mathrm{W}[\phi_0,\ldots,\phi_{M-1}](x)\bigr|. \tag{11}$$

n 個の関数 $f_1(x),\ldots,f_n(x)$ に対するロンスキアンは

$$\mathrm{W}\,[f_1,\ldots,f_n](x)\stackrel{\text{def}}{=}\det\Bigl(\frac{d^{j-1}f_k(x)}{dx^{j-1}}\Bigr)_{1\le j,k\le n},$$

で定義され ($n=0$ に対しては $\mathrm{W}\,[\cdot](x)=1$)，(10) は性質

$$\mathrm{W}\bigl[\mathrm{W}[f_1,f_2,\ldots,f_n,g],\mathrm{W}[f_1,f_2,\ldots,f_n,h]\bigr](x)$$
$$=\mathrm{W}[f_1,f_2,\ldots,f_n](x)\,\mathrm{W}[f_1,f_2,\ldots,f_n,g,h](x),$$

を用いて示される．(11) の $\mathrm{W}[\phi_0,\phi_1,\ldots,\phi_{M-1}](x)$ は $x_1<x<x_2$ において 0 にならず定符号であり，ポテンシャルは非特異になっている．

変換 (8) はダルブー変換[3] と呼ばれるものである．しばらくの間，シュレディンガー方程式 (2) を単に 2 階微分方程式 $\mathcal{H}\psi(x)=\mathcal{E}\psi(x)$ と思い，解の 2 乗可積分性やハミルトニアン等の演算子の非特異性については気にしない事にする．シュレディンガー方程式の勝手な解 $\tilde\phi(x)$, $\mathcal{H}\tilde\phi(x)=\tilde{\mathcal{E}}\tilde\phi(x)$, を一つ取ってくると，ハミルトニアンは

$$\mathcal{H}=\hat{\mathcal{A}}^\dagger\hat{\mathcal{A}}+\tilde{\mathcal{E}},\quad \hat{\mathcal{A}}\stackrel{\text{def}}{=}\tfrac{d}{dx}-\partial_x\log\bigl|\tilde\phi(x)\bigr|, \tag{12}$$

と因数分解される．$\tilde\phi(x)$ は 2 乗可積分でなくても構わないし，$x_1<x<x_2$ に零点を持つかもしれない．零点を持つ場合には $\hat{\mathcal{A}}$ は特異性を持ち，$\hat{\mathcal{A}}$ と $\hat{\mathcal{A}}^\dagger$ は形式的に共役なだけで，本当の意味での共役 (つまり $(f,\mathcal{A}g)=(\mathcal{A}^\dagger f,g)$) にはならない．この $\tilde\phi(x)$ を種関数とするダルブー変換は

$$\mathcal{H}^{\text{new}}\stackrel{\text{def}}{=}\hat{\mathcal{A}}\hat{\mathcal{A}}^\dagger+\tilde{\mathcal{E}},\quad \psi^{\text{new}}(x)\stackrel{\text{def}}{=}\hat{\mathcal{A}}\psi(x). \tag{13}$$

で与えられ，

$$\mathcal{H}^{\text{new}}\psi^{\text{new}}(x)=\mathcal{E}\psi^{\text{new}}(x), \tag{14}$$

$$\mathcal{H}^{\text{new}}\tilde\phi^{-1}(x)=\tilde{\mathcal{E}}\tilde\phi^{-1}(x)\quad\bigl(\Leftarrow\hat{\mathcal{A}}^\dagger\tilde\phi^{-1}(x)=0\bigr), \tag{15}$$

が成り立つ事が容易に分かる ($f^{-1}(x)\stackrel{\text{def}}{=}f(x)^{-1}$)．式 (14)–(15) は ψ^{new} 及び $\tilde\phi^{-1}$ が新しいシュレディンガー方程式の解である事を意味しているが，これが全ての解と言っている訳ではない．種関数に対応する新しい状態は，$\tilde\phi^{\text{new}}(x)=\hat{\mathcal{A}}\tilde\phi(x)=0$ となる事から，新しい系においては取り除かれている事に注意しておく．複数の種関数 $\tilde\phi_{d_1},\ldots,\tilde\phi_{d_M}$ ($\mathcal{H}\tilde\phi_{d_j}(x)=\tilde{\mathcal{E}}_{d_j}\tilde\phi_{d_j}(x)$) を用いればダルブー変換を繰り返す事ができ，

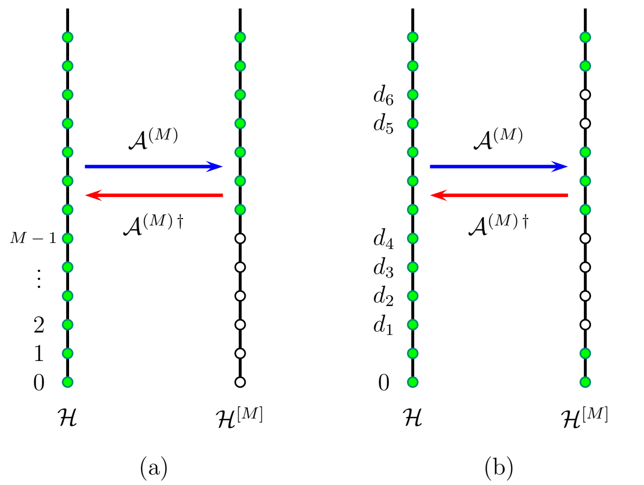


図 2　クラムの定理 (a) 及びその拡張 (b) の模式図: 白丸は状態が取り除かれている事を表す．(b) は $M=6$ の例．$\mathcal{A}^{(M)}\stackrel{\text{def}}{=}\mathcal{A}^{[M]}\cdots\mathcal{A}^{[2]}\mathcal{A}^{[1]}$

M ステップ後のハミルトニアン $\mathcal{H}^{[M]}=p^2+U^{[M]}(x)$ は，任意の解 ψ ($\mathcal{H}\psi(x)=\mathcal{E}\psi(x)$) に対して

$$\mathcal{H}^{[M]}\psi^{[M]}(x)=\mathcal{E}\psi^{[M]}(x), \tag{16}$$

$$\psi^{[M]}(x)=\frac{\mathrm{W}[\tilde\phi_{d_1},\tilde\phi_{d_2},\ldots,\tilde\phi_{d_M},\psi](x)}{\mathrm{W}[\tilde\phi_{d_1},\tilde\phi_{d_2},\ldots,\tilde\phi_{d_M}](x)}, \tag{17}$$

$$U^{[M]}(x)=U(x)-2\partial_x^2\log\bigl|\mathrm{W}[\tilde\phi_{d_1},\ldots,\tilde\phi_{d_M}](x)\bigr|, \tag{18}$$

という性質を持つ．

この $\mathcal{H}^{[M]}$ が非特異かどうか，つまり，$\mathrm{W}[\tilde\phi_{d_1},\ldots,\tilde\phi_{d_M}](x)$ が $x_1<x<x_2$ において 0 にならず定符号であるかどうか，は種関数 $\tilde\phi_{d_j}$ の選び方に依存する．また固有関数 (つまり 2 乗可積分な解) がどれだけあるかもそうである．1 ステップの場合を考えると，$\hat{\mathcal{A}}$, $\hat{\mathcal{A}}^\dagger$ に零モード ($\hat{\mathcal{A}}$, $\hat{\mathcal{A}}^\dagger$ を掛けて 0 になる 2 乗可積分な解) があるかどうかが問題で，零モードが無ければ等スペクトル，零モードがあれば状態が削除・追加される事になる．クラムの定理は固有状態 $\phi_0,\phi_1,\ldots,\phi_{M-1}$ を種関数としたが，固有関数 $\phi_{d_1},\phi_{d_2},\ldots,\phi_{d_M}$ を種関数とする拡張はクライン (Krein) とアドラー (Adler) によって考えられ[4]，条件

$$\prod_{j=1}^{M}(m-d_j)\ge 0\quad(\forall m\in\mathbb{Z}_{\ge 0}), \tag{19}$$

が満たされる場合に非特異となる．この条件は，基底状態から連続して幾つでも (これはクラムの場合である)，その上は連続する偶数個の励起状態を何組でも取り除いてもよい，という事である (図 2 参照)．クラムの定理及びその拡張では，$\mathcal{A}$ に零モードがあり，状態が削除される．種関数として仮想状態 (§ 4.3 参照) を取ると完全に等スペクトル，擬仮想状態を取ると状態が追加される．

クラムの定理とその拡張及びダルブー変換は，元の系が解ける解けないに拘らず成り立っている．元の系が解ける

系の場合には，(17) によって変形後の系も解ける系となる．よって，1 つ解ける模型があれば，それを変形して無数の解ける模型が得られる可能性がある．

3．解けるための十分条件

解けるための十分条件として，閉関係式 (closure relation) [5] と形状不変性 (shape invariance)[6] という 2 つが知られている．閉関係式は生成消滅演算子と関係しており，ハイゼンベルク描像で系を見たもので，古典論においても成立する．一方，形状不変性はシュレディンガー描像に対応し，量子論でのみ成立する話であるが，適用範囲はこちらの方が広い．どちらの方法も，基底状態に微分演算子を掛けるだけで励起状態が下から順番に具体的に求まっていく．但し，その様にして得られた励起状態をまとまった綺麗な表式で表せるかどうかはまた別問題である．クラムの定理と組み合わせた形状不変性の話は，因子化ハミルトニアンの方法，超対称量子力学の方法などとも呼ばれている．

3.1．閉関係式

調和振動子の量子力学において，生成・消滅演算子が $a^\dagger=\frac{1}{\sqrt{2}}(-ip+x)$, $a=\frac{1}{\sqrt{2}}(ip+x)$ で与えられる事は普段は何も考えずに当たり前の様に思っているが，元々は x のハイゼンベルク解

$$x(t)=e^{iHt}xe^{-iHt}=\tfrac{1}{2}(-ip+x)e^{2it}+\tfrac{1}{2}(ip+x)e^{-2it},$$

の負・正振動数部分という所から来ていた．これと同じ事を動径振動子や DPT 模型などについて考えてみよう．これらの模型では固有関数が (3) という形をしていた．特別な座標 $\eta(x)$ が存在して

$$\big[\mathcal{H},[\mathcal{H},\eta]\big]=\eta R_0+[\mathcal{H},\eta]R_1+R_{-1}, \tag{20}$$

を満たしているとしよう．ここで $R_i=R_i(\mathcal{H})$ は $\mathcal{H}$ の多項式であり (R_0,R_1,R_{-1} はそれぞれ高々1, 0, 1 次式)，この関係式を閉関係式と呼ぶ．模型 (i)–(iii) に対しては

$$\begin{aligned}
&\text{(i)}\quad R_0=4,\quad R_1=0,\quad R_{-1}=0,\\
&\text{(ii)}\quad R_0=16,\quad R_1=0,\quad R_{-1}=-8(\mathcal{H}+2g+1),\\
&\text{(iii)}\quad R_0=16\big(\mathcal{H}+(g+h)^2-1\big),\quad R_1=8,\\
&\qquad R_{-1}=16(g-h)(g+h-1),
\end{aligned}$$

である．ハイゼンベルク方程式 $i\frac{d}{dt}A(t)=[A(t),\mathcal{H}]$ の解は，

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

で与えられるので ($(\mathrm{ad}\,\mathcal{H})A\stackrel{\text{def}}{=}[\mathcal{H},A]$, $(\mathrm{ad}\,\mathcal{H})^2A=[\mathcal{H},[\mathcal{H},A]]$, $(\mathrm{ad}\,\mathcal{H})^3A=[\mathcal{H},[\mathcal{H},[\mathcal{H},A]]],\ldots$)，$(\mathrm{ad}\,\mathcal{H})^nA$ が分かればよい．閉関係式 (20) があれば，$(\mathrm{ad}\,\mathcal{H})^n\eta$ を η, $[\mathcal{H},\eta]$, 1 の $\mathcal{H}$-係数の線型結合として具体的に表す事ができるので，η のハイゼンベルク解が得られる[5]：

$$\begin{aligned}
&e^{it\mathcal{H}}\eta e^{-i\mathcal{H}t}=a^{(+)}e^{i\alpha_+t}+a^{(-)}e^{i\alpha_-t}-R_{-1}R_0^{-1},\\
&a^{(\pm)}\stackrel{\text{def}}{=}\big(\pm[\mathcal{H},\eta]\pm(\eta+R_{-1}R_0^{-1})\alpha_\mp\big)(\alpha_+-\alpha_-)^{-1},\\
&\alpha_\pm=\alpha_\pm(\mathcal{H})\stackrel{\text{def}}{=}\tfrac{1}{2}\big(R_1\pm\sqrt{R_1^2+4R_0}\big).
\end{aligned} \tag{21}$$

“振動数”$\alpha_\pm(\mathcal{H})$ がハミルトニアンの値に依るので，調和振動子 ($\alpha_\pm=\pm2$ が定数) とは異なるが，正弦関数で振動するので，この $\eta(x)$ は正弦的座標 (sinusoidal coordinate) と呼ばれる．固有関数が (3) の形をしている場合には，調和振動子と同じ様に，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，

$$a^{(+)}\phi_n(x)=A_n\phi_{n+1}(x),\quad a^{(-)}\phi_n(x)=C_n\phi_{n-1}(x), \tag{22}$$

を与える事が示される[5]．ここで係数 A_n, C_n は直交多項式 $P_n(\eta)$ の 3 項関係式,

$$\eta P_n(\eta)=A_nP_{n+1}(\eta)+B_nP_n(\eta)+C_nP_{n-1}(\eta), \tag{23}$$

の係数である．(通常の) 直交多項式はこの 3 項関係式を満たし，逆にこの 3 項関係式を満たす多項式は直交多項式になる事が知られている (ファバード (Favard) の定理[7])．エネルギー固有値 $\mathcal{E}_n$ は過剰決定系の方程式

$$\mathcal{E}_{n\pm1}-\mathcal{E}_n=\alpha_\pm(\mathcal{E}_n), \tag{24}$$

を満たす．$\mathcal{E}_0=0$ から始めて，この式によって $\mathcal{E}_n$ が決まっていく ($\alpha_\pm$ の表式にある平方根は上手く外れてくれる)．基底状態を $\mathcal{A}\phi_0(x)=0$ を解いて求めれば，それに生成演算子を掛ける事によって励起状態 $\phi_n(x)\propto a^{(+)\,n}\phi_0(x)$ が具体的に求まっていく．$a^{(+)}$ の表式には $\mathcal{H}$ が含まれているが，この様に ϕ_n を下から順に求めていけば何も問題は生じない．生成消滅演算子を形式的に定義する議論はこれまでに数多く存在していたが，この様に微分演算子として具体的にまた自然な形で与えたのはこれが初めてであった．

(1) の形のハミルトニアンに対して，閉関係式を満たす正弦的座標が存在する模型は分類する事ができ，上の (i)–(iii) の他に，固有状態が有限個であるローゼン・モースポテンシャルなどが含まれる．閉関係式は交換子の間の関係式であり，交換子 $[\cdot,\cdot]$ をポアッソン括弧 $\{\cdot,\cdot\}_{\mathrm{PB}}$ に置き換える事で古典極限を取る事ができる．古典力学のハミルトン形式での運動方程式 $\frac{d}{dt}A(t)=\{A(t),\mathcal{H}\}_{\mathrm{PB}}$ の解は

$$A(t)=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{t^n}{n!}\frac{d^nA(0)}{dt^n}=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-t)^n}{n!}(\mathrm{ad}_{\mathrm{PB}}\mathcal{H})^nA(0),$$

($(\mathrm{ad}_{\mathrm{PB}}\mathcal{H})A\stackrel{\text{def}}{=}\{\mathcal{H},A\}_{\mathrm{PB}}$) と表されるので，閉関係式があれば，正弦的座標 η の時間依存性を決定する事ができる．

3.2. 形状不変性

系が幾つかのパラメータを含んでいるとし，それを $\boldsymbol{\lambda}=(\lambda_1,\lambda_2,\ldots)$ とする．この $\boldsymbol{\lambda}$ 依存性を明記したい場合には，$\mathcal{H}(\boldsymbol{\lambda})$, $\mathcal{A}(\boldsymbol{\lambda})$, $\phi_n(x;\boldsymbol{\lambda})$, $\mathcal{E}_n(\boldsymbol{\lambda})$, 等と書く事にする．$\mathcal{A}(\boldsymbol{\lambda})$ が

$$\mathcal{A}(\boldsymbol{\lambda})\mathcal{A}(\boldsymbol{\lambda})^\dagger=\mathcal{A}(\boldsymbol{\lambda}+\boldsymbol{\delta})^\dagger\mathcal{A}(\boldsymbol{\lambda}+\boldsymbol{\delta})+\mathcal{E}_1(\boldsymbol{\lambda}), \qquad (25)$$

を満たす場合に[2]，系には形状不変性があると言う．例えば，模型 (i)–(iii) では，(i) $\boldsymbol{\lambda}$ 無し，(ii) $\boldsymbol{\lambda}=g$, $\boldsymbol{\delta}=1$，(iii) $\boldsymbol{\lambda}=(g,h)$, $\boldsymbol{\delta}=(1,1)$ である．この関係式とクラムの定理を組み合わせてみると，

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

となる事から，$\mathcal{H}^{[1]}$ は元のハミルトニアンと形が変わらずにパラメータがずれただけのものになっている事が分かり，$\mathcal{A}^{[1]}(\boldsymbol{\lambda})=\mathcal{A}(\boldsymbol{\lambda}+\boldsymbol{\delta})$, $\phi_n^{[1]}(x;\boldsymbol{\lambda})\propto\phi_{n-1}(x;\boldsymbol{\lambda}+\boldsymbol{\delta})$, $\mathcal{E}_n(\boldsymbol{\lambda})=\mathcal{E}_{n-1}(\boldsymbol{\lambda}+\boldsymbol{\delta})+\mathcal{E}_1(\boldsymbol{\lambda})$ となる．これを繰り返せば，$\mathcal{A}^{[s]}(\boldsymbol{\lambda})=\mathcal{A}(\boldsymbol{\lambda}+s\boldsymbol{\delta})$ であり，

$$\mathcal{E}_n(\boldsymbol{\lambda})=\sum_{s=0}^{n-1}\mathcal{E}_1(\boldsymbol{\lambda}+s\boldsymbol{\delta}), \qquad (26)$$

$$\begin{aligned}\phi_n(x;\boldsymbol{\lambda})\propto\mathcal{A}(\boldsymbol{\lambda})^\dagger\mathcal{A}(\boldsymbol{\lambda}+\boldsymbol{\delta})^\dagger\cdots\mathcal{A}\big(\boldsymbol{\lambda}+(n-1)\boldsymbol{\delta}\big)^\dagger&\\ \times\phi_0(x;\boldsymbol{\lambda}+n\boldsymbol{\delta}),&\end{aligned} \qquad (27)$$

を得る ((9) 参照)．$\mathcal{A}=\frac{d}{dx}-\partial_x\log|\phi_0(x)|$ なので，$\mathcal{E}_n$ と ϕ_n が $\mathcal{E}_1$ と ϕ_0 だけを用いて書き表された．$\phi_n(x;\boldsymbol{\lambda})$ と $\phi_{n-1}(x;\boldsymbol{\lambda}+\boldsymbol{\delta})$ は $\mathcal{A}(\boldsymbol{\lambda})$ と $\mathcal{A}(\boldsymbol{\lambda})^\dagger$ で移り合うので，その比例係数を

$$\mathcal{A}(\boldsymbol{\lambda})\phi_n(x;\boldsymbol{\lambda})=f_n(\boldsymbol{\lambda})\phi_{n-1}(x;\boldsymbol{\lambda}+\boldsymbol{\delta}), \qquad (28)$$

$$\mathcal{A}(\boldsymbol{\lambda})^\dagger\phi_{n-1}(x;\boldsymbol{\lambda}+\boldsymbol{\delta})=b_{n-1}(\boldsymbol{\lambda})\phi_n(x;\boldsymbol{\lambda}), \qquad (29)$$

とする．$\mathcal{E}_n(\boldsymbol{\lambda})=f_n(\boldsymbol{\lambda})b_{n-1}(\boldsymbol{\lambda})$ である．固有関数が (3) の形をしている場合に基底状態の寄与を剥がすと，(28)–(29) は

$$\mathcal{F}(\boldsymbol{\lambda})P_n(\eta)=f_n(\boldsymbol{\lambda})P_{n-1}(\eta;\boldsymbol{\lambda}+\boldsymbol{\delta}), \qquad (30)$$

$$\mathcal{B}(\boldsymbol{\lambda})P_{n-1}(\eta;\boldsymbol{\lambda}+\boldsymbol{\delta})=b_{n-1}(\boldsymbol{\lambda})P_n(\eta;\boldsymbol{\lambda}), \qquad (31)$$

となる．ここで $\mathcal{F}$, $\mathcal{B}$ は $\mathcal{F}(\boldsymbol{\lambda})\stackrel{\text{def}}{=}\phi_0(x;\boldsymbol{\lambda}+\boldsymbol{\delta})^{-1}\circ\mathcal{A}(\boldsymbol{\lambda})\circ\phi_0(x;\boldsymbol{\lambda})$, $\mathcal{B}(\boldsymbol{\lambda})\stackrel{\text{def}}{=}\phi_0(x;\boldsymbol{\lambda})^{-1}\circ\mathcal{A}(\boldsymbol{\lambda})^\dagger\circ\phi_0(x;\boldsymbol{\lambda}+\boldsymbol{\delta})$ で，x 微分を η 微分に書き直したものである．(30)–(31) は直交多項式の前方・後方ずらし関係式 (forward/backward shift relations) と呼ばれているものだが，量子力学の観点からは形状不変性の帰結の一つであり，統一的に理解できる．

[2]一般には $\boldsymbol{\lambda}+\boldsymbol{\delta}$ の部分は $\boldsymbol{\lambda}$ で決まる $\boldsymbol{\lambda}'$ とすべきであるが，パラメータを上手く選べば定数 $\boldsymbol{\delta}$ だけずらす形にできる．

4. 新しい種類の直交多項式

4.1. ボホナーの定理

通常の直交多項式 $P_n(\eta)$ $(n=0,1,2,\ldots)$ は n 次式で，全ての次数が揃っている事からヒルベルト空間の完全系をなしている．シュレディンガー方程式 (2) は 2 階微分方程式なので，2 階微分方程式を満たす直交多項式が物理学に取って重要であるが，これには次の定理 (ボホナー (Bochner) の定理[8]) が古くから知られている：「直交多項式 $P_n(\eta)$, deg $P_n=n$ $(n=0,1,2,\ldots)$ が 2 階微分方程式

$$p(\eta)P_n''(\eta)+q(\eta)P_n'(\eta)+r(\eta)P_n(\eta)=\lambda_nP_n(\eta), \qquad (32)$$

($p(\eta),q(\eta),r(\eta)$ は η の多項式，λ_n は定数) を満たすならば，それはエルミート，ラゲール，ヤコビ多項式のいずれかである[3].」この様なノーゴー定理では，仮定の見直しが新しい発展につながる事がしばしばある．例えば，コールマン・マンデューラの定理と超対称性・量子群の関係が素粒子論では有名である．ボホナーの定理に対しては，仮定を変える試みとして例えば，

(A) 2 階微分方程式を高階微分方程式に置き換える．

(B) 2 階微分方程式を 2 階差分方程式に置き換える．

が行われて来た．(A) の方向の多項式はクラール (Krall) 多項式と呼ばれている．(B) の方向では，アスキー (Askey)・ウィルソン (Wilson) 多項式，q-ラカー (Racah) 多項式を頂点とする (q-) 超幾何直交多項式のアスキースキーム[9] が 1980 年代に得られた．これに対してボホナーの定理の拡張版が存在している．(A) と (B) の両方を合わせたものを考える事も可能である．アスキースキームの直交多項式は離散量子力学という観点から理解する事ができる．

変更 (A)(B) は直交多項式が満たす方程式を見直すものであったが，deg $P_n=e_n$ としてこの次数に着目し，

(C) 次数に欠落がある：$\{e_0,e_1,e_2,\ldots\}\subsetneqq\{0,1,2,\ldots\}$.

という変更が近年提案された．しかし単に次数を欠いてしまっては意味が無いので，P_n 達が完全系をなすという性質は保持しているものを考えると言うのである．次数に欠落があっては完全系にならないのではと普通は思ってしまう所だが，2 階微分方程式を満たし，0 次式が存在せず 1 次式から始まるが完全系をなす直交多項式が 2008 年に見い出され，例外直交多項式 (exceptional orthogonal polynomial) と名付けられた[10]．

4.2. 新しい種類の直交多項式

新しい種類の直交多項式として，多項式 $\mathcal{P}_n(\eta)$ $(n=0,1,2,\ldots)$, deg $\mathcal{P}_n=e_n$, が条件

(ア) 重み $\mathrm{w}(\eta)$ の内積 $(\cdot,\cdot)_{\mathrm{w}}$ に関して直交多項式である．

(イ) 内積 $(\cdot,\cdot)_{\mathrm{w}}$ のヒルベルト空間の完全系をなす．

[3]もう一つベッセル多項式 (ベッセル関数とは別物) が許されるが[7]，(全次数を考えると) 重み関数が正定値ではないのでここでは考えない．

(ウ) 次数に欠落がある：$\{e_0, e_1, e_2, \ldots\} \subsetneqq \{0, 1, 2, \ldots\}$.
を満たすものを考えよう．ボホナーの定理の拡張を考えるので，またはシュレディンガー方程式 (2) を考えるので，以下では更に
(エ) 2 階微分方程式 (32) を満たす.
を課す ($p(\eta), q(\eta), r(\eta)$ は η の有理式)．(ウ) に関して，欠けている次数の集合を I として ($\{e_0, e_1, \ldots\} = \{0, 1, \ldots\} \backslash I$), 次の 2 つの場合，ケース (1) $I = \{0, 1, \ldots, \ell - 1\}$，ケース (2) $I \neq \{0, 1, \ldots, \ell - 1\}$ を区別しておく．私としては主にケース (1) に関心がある．

2008年にゴメス-ウジャテ (Gómez-Ullate)・カムラン (Kamran)・ミルソン (Milson) は，2 階微分方程式を満たし，0 次式が存在せず 1 次式から始まるが完全系をなす直交多項式 (例外直交多項式) を構成し，X_1-ラゲール，X_1-ヤコビ多項式と呼んだ[10]．これは，ラゲール多項式・ヤコビ多項式を基にしたもので，うまい "基底" と重み関数を持ってきて直交化したものである．この X_1-多項式で励起状態が記述される解ける量子力学模型がケンヌ (Quesne) によってすぐさま構成された[11]．この解ける量子力学模型には形状不変性があり，2009 年に小竹・佐々木は形状不変性を頼りにこの模型を拡張し，ℓ 次式から始まる X_ℓ-ラゲール，ヤコビ多項式が登場する形状不変な量子力学模型及びこの例外直交多項式を，全ての自然数 ℓ に対して構成した[12]．レビュー論文 [6] を見ると形状不変な模型のリストは高々数十個であったものが，ここで一気に無限個に膨れ上がった．しかしこの段階では我々は例外直交多項式の構造をよく理解していなかったため，例外直交多項式の具体的な表式は (27) から強引に求めたものであった．この年の暮には例外直交多項式の構造が少し分かり[13]，2010 年にダルブー変換によるものである事が明らかになった[14]．ダルブー変換であれば繰り返す事ができ，2011 年に，2 ステップのラゲールの場合[15]，そして一般の M ステップのラゲール及びヤコビの場合[16] が得られた．こうして得られた新しい種類の直交多項式は種関数の多項式部分の次数 $\{d_1, d_2, \ldots, d_M\}$ でラベルされ，元々の添字 n に加えて多くの添字を持つので，我々はこれを多添字直交多項式 (multi-indexed orthogonal polynomial) と名付けた．これらは全てケース (1) のものであり，この場合には添字 n は節の数を表している．

4.3. 系統的構成法

多添字直交多項式を系統的に構成するには，多項式型解 (3) を持つ解ける模型に，多項式型の種関数 $\tilde{\phi}_{\rm v}(x) = (x \text{ のある関数}) \times \xi_{\rm v}\big(\eta(x)\big)$ ($\xi_{\rm v}(\eta)$ は η の多項式) を用いたダルブー変換を施せばよい．種関数のラベルを $\mathcal{D} = \{d_1, \ldots, d_M\}$ とおく．(17) に現れるロンスキアンは

$$\mathrm{W}[\tilde{\phi}_{d_1}, \ldots, \tilde{\phi}_{d_M}](x) = (x \text{ のある関数}) \times \Xi_{\mathcal{D}}\big(\eta(x)\big),$$

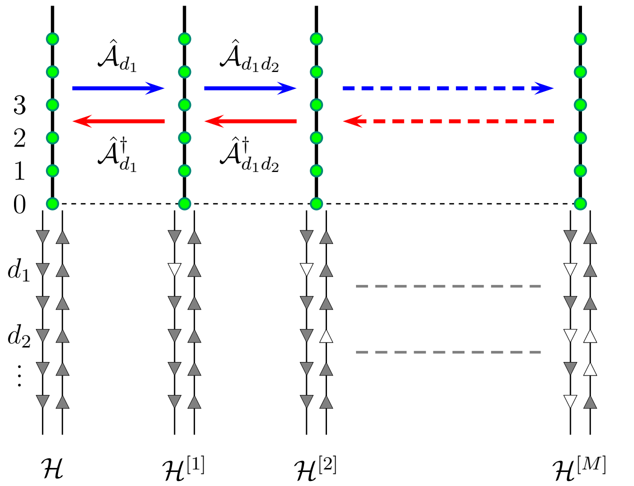


図 3　仮想状態除去法の模式図: 丸は固有状態，三角は仮想状態 (タイプ I と II) を表し，白三角は仮想状態が取り除かれている事を表す．ヒルベルト空間に属さない仮想状態を取り除いており，ヒルベルト空間の固有状態の数は変わらない．$\hat{\mathcal{A}}^{[1]} = \hat{\mathcal{A}}_{d_1}, \hat{\mathcal{A}}^{[2]} = \hat{\mathcal{A}}_{d_1 d_2}, \cdots$

$$\mathrm{W}[\tilde{\phi}_{d_1}, \ldots, \tilde{\phi}_{d_M}, \phi_n](x) = (x \text{ のある関数}) \times P_{\mathcal{D},n}\big(\eta(x)\big),$$

($\Xi_{\mathcal{D}}(\eta)$, $P_{\mathcal{D},n}(\eta)$ は η の多項式) という形になるので，固有関数 (17) は

$$\phi_{\mathcal{D}\,n}(x) = \Psi_{\mathcal{D}}(x) P_{\mathcal{D},n}\big(\eta(x)\big),\ \Psi_{\mathcal{D}}(x) = \frac{(x \text{ のある関数})}{\Xi_{\mathcal{D}}\big(\eta(x)\big)}, \tag{33}$$

という多項式型になる．$\Xi_{\mathcal{D}}(\eta)$ は分母多項式と呼ばれ，$P_{\mathcal{D},n}(\eta)$ が多添字直交多項式となる．ポテンシャルには $\Xi_{\mathcal{D}}(\eta)$ が分母に現れる η の有理式が加わる事になるので，有理変形と呼ばれている．多項式の次数に欠落があるのに完全系をなすのは不思議な感じがしたが，量子力学模型として考えると，固有関数 $\phi_{\mathcal{D}\,n}(x)$ が全て求まればそれらが完全系を成す事はスツルム・リュービルの定理により保証されており，$P_{\mathcal{D},n}(\eta)$ が n 次式ではなかっただけの事と思える．

ハミルトニアンが非特異であるためには種関数を上手く選ぶ必要がある．種関数として固有状態を取ると，条件 (19) が満たされていればよく，この場合はケース (2) の多添字直交多項式が得られる[4]．元の系の形状不変性は変形後には無くなってしまう．ケース (1) の多添字直交多項式を得るには，種関数として仮想状態 (virtual state)[16] の波動関数を取る．仮想状態の波動関数 $\tilde{\phi}_{\rm v}(x)$ とは，(一) 多項式型解，(二) 負エネルギー，(三) $\|\tilde{\phi}_{\rm v}\| = \infty$ (つまりヒルベルト空間に属していない)，(四) (x_1, x_2) に零点を持たない，(五) $\|\tilde{\phi}_{\rm v}^{-1}\| = \infty$，という条件を満たすものである (これらの条件は独立という訳ではない)．$\tilde{\phi}_{\rm v}$ の 2 乗可積分性は端点 x_1, x_2 で破れていて，右端 x_2 で破れるものをタイプ I，左端 x_1 で破れるものをタイプ II と呼ぶ．仮想状態を種関数として

[4] アドラーの 1994 年の論文[4] に調和振動子に対して $\mathcal{D} = \{1, 2\}$ とした解ける模型が例として紹介されているが，この当時には次数に欠落がある直交多項式という視点が存在していなかった．

得られる系は元の系と等スペクトルである (図 3 参照)．元の系の形状不変性は変形後にも保たれる．条件 (一)〜(三) だけを満たすものを擬仮想状態 (pseudo virtual state)[17] と呼び，2 乗可積分性は両端で破れていて (タイプ III と言う)，これを種関数として得られる系には状態が追加され，固有関数を種関数として得られる系と等価 (但しパラメータはずらす) になっている．

4.4. 具体例

(擬) 仮想状態はハミルトニアンの離散対称性を利用して見付けられる．系 (ii)–(iii) に対して，パラメータに対するひねり演算子を，(ii) $\mathfrak{t}^{\mathrm{II}}(\boldsymbol{\lambda})=1-g$, (iii) $\mathfrak{t}^{\mathrm{I}}(\boldsymbol{\lambda})=(g,1-h)$, $\mathfrak{t}^{\mathrm{II}}(\boldsymbol{\lambda})=(1-g,h)$ と置くと，ハミルトニアンには

$$\begin{aligned}
&\text{(ii)}\quad \text{タイプ I}:\mathcal{H}(\boldsymbol{\lambda})=-\mathcal{H}(\boldsymbol{\lambda})\,\big|_{x\to ix}-2(2g+1),\\
&\qquad\ \ \text{タイプ II}:\mathcal{H}(\boldsymbol{\lambda})=\mathcal{H}\big(\mathfrak{t}^{\mathrm{II}}(\boldsymbol{\lambda})\big)-2(2g-1),\\
&\text{(iii)}\quad \text{タイプ I}:\mathcal{H}(\boldsymbol{\lambda})=\mathcal{H}\big(\mathfrak{t}^{\mathrm{I}}(\boldsymbol{\lambda})\big)-(2g+1)(2h-1),\\
&\qquad\ \ \text{タイプ II}:\mathcal{H}(\boldsymbol{\lambda})=\mathcal{H}\big(\mathfrak{t}^{\mathrm{II}}(\boldsymbol{\lambda})\big)-(2g-1)(2h+1),
\end{aligned}$$

という対称性がある．この性質により，$\mathcal{H}(\boldsymbol{\lambda})$ に対するシュレディンガー方程式の解においてパラメータをひねってやれば (または $x\to ix$ にすれば)，異なるエネルギーの解が得られる事になる．タイプ I, II の仮想状態 $\tilde{\phi}^{\mathrm{I}}_{\mathrm{v}}$, $\tilde{\phi}^{\mathrm{II}}_{\mathrm{v}}$ は

$$\begin{aligned}
&\text{(ii)}:\tilde{\phi}^{\mathrm{I}}_{\mathrm{v}}(x;\boldsymbol{\lambda})=i^{-g}\phi_{\mathrm{v}}(ix;\boldsymbol{\lambda}),\ \tilde{\phi}^{\mathrm{II}}_{\mathrm{v}}(x;\boldsymbol{\lambda})=\phi_{\mathrm{v}}\big(x;\mathfrak{t}^{\mathrm{II}}(\boldsymbol{\lambda})\big),\\
&\text{(iii)}:\tilde{\phi}^{\mathrm{I}}_{\mathrm{v}}(x;\boldsymbol{\lambda})=\phi_{\mathrm{v}}\big(x;\mathfrak{t}^{\mathrm{I}}(\boldsymbol{\lambda})\big),\ \tilde{\phi}^{\mathrm{II}}_{\mathrm{v}}(x;\boldsymbol{\lambda})=\phi_{\mathrm{v}}\big(x;\mathfrak{t}^{\mathrm{II}}(\boldsymbol{\lambda})\big),
\end{aligned}$$

で与えられる．I, II の操作を続けて行えば，タイプ III の擬仮想状態が得られる．系 (i) の離散対称性は $\mathcal{H}=-\mathcal{H}|_{x\to ix}-2$ で，擬仮想状態が得られるが，仮想状態は存在しない．系 (ii)–(iii) に対して，パラメータ g,h の値をある程度大きく取っておけば，タイプ I と II の仮想状態を任意個数種関数として用いて系を変形しても非特異な系が得られる．こうして得られる固有関数 (33) に現れる $P_{\mathcal{D},n}(\eta)$ がラゲール及びヤコビの多添字直交多項式である．$\Psi_{\mathcal{D}}(x)$ の分子の x の関数は，$\phi_0(x)$ でパラメータをずらしたものになる．分母多項式 $\Xi_{\mathcal{D}}(\eta)$ は η の $\ell_{\mathcal{D}}$ 次式で，x の変域 (x_1,x_2) に対応する η の変域で零点を持たないため，非特異なハミルトニアンになっている．ここで $\ell_{\mathcal{D}}=\sum_{j=1}^{M}d_j-\frac{1}{2}M(M-1)+2M_{\mathrm{I}}M_{\mathrm{II}}$ (M_{I}, M_{II} は d_j 達のタイプ I, II の数) である．$P_{\mathcal{D},n}(\eta)$ の次数は $\ell_{\mathcal{D}}+n$ で，x の変域 (x_1,x_2) に対応する η の変域で n 個の零点を持ち，残りの $\ell_{\mathcal{D}}$ 個の零点は η の複素平面の他の領域にある．元の系の形状不変性により，$P_{\mathcal{D},0}(\eta;\boldsymbol{\lambda})\propto\Xi_{\mathcal{D}}(\eta;\boldsymbol{\lambda}+\boldsymbol{\delta})$ となっている．$P_{\mathcal{D},n}(\eta)$ が満たす 2 階微分方程式 (32) の係数は η の有理式でその分母には分母多項式 $\Xi_{\mathcal{D}}(\eta)$ が現れている．η の複素平面上に $\Xi_{\mathcal{D}}(\eta)$ は $\ell_{\mathcal{D}}$ 個の零点を持ち，ヤコビの場合には $3+\ell_{\mathcal{D}}$ 個の確定特異点を持つフックス型微分方程式になっており，$P_{\mathcal{D},n}(\eta)$ がその大域解を与えている．ラゲールではその合流版になっている．

一番簡単な多添字直交多項式を書き下してみよう．ラゲールで $\tilde{\phi}^{\mathrm{I}}_1(x)1$ つを種関数とした場合, $\mathcal{D}=\{1^{\mathrm{I}}\}$, を考える．ポテンシャルは (5) から変形されて,

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

となり，固有関数は

$$\phi_n(x)=\frac{e^{-\frac{1}{2}x^2}x^{g+1}}{x^2+g+\frac{1}{2}}P_{\mathcal{D},n}(x^2),$$

$$P_{\mathcal{D},n}(\eta)=(g+\tfrac{1}{2}+\eta)\partial_\eta L_n^{(g-\frac{1}{2})}(\eta)-(g+\tfrac{3}{2}+\eta)L_n^{(g-\frac{1}{2})}(\eta),$$

で与えられる．一般の場合の表式は文献[16] を参照されたい．

5. おわりに

解ける量子力学模型と直交多項式の最近の話題として，生成消滅演算子と新しい種類の直交多項式の 2 つを紹介してきた．特に新しい種類の直交多項式は直交多項式に新たな分野を切り開き，現在数学者及び物理学者によって精力的に研究が進められている．直交多項式は数学者によって丁寧に調べられてきたが，直交多項式と重み関数は “別々に” 取り扱われるのが通常である．一方，物理学者の解ける量子力学模型によるアプローチでは，重み関数の平方根と直交多項式を掛け合わせて “一体化させた” 固有関数を取り扱っており，量子力学で培われた様々な手法が適用可能である．この量子力学的手法無しでは，この様に短期間に新しい種類の直交多項式を具体的に構成する事はできなかったと思われる．

詳しく紹介できなかった話題として，多添字直交多項式の様々な性質と離散量子力学[18] がある．前者の話題としては，等価性 (異なる $\mathcal{D}$ が同じ多添字直交多項式を与える)[19]，再帰関係式 (3 項関係式に代わるもの)[20]，などがある．後者は私の元々の動機となったもので，差分方程式に従う直交多項式が現れる．クラムの定理やダルブー変換に対応する性質があり，ロンスキアンの代わりにカソラティアンと呼ばれる行列式を用いて様々な量が表される．形状不変な系の構成や，アスキー・ウィルソン多項式・q-ラカー多項式などに対する多添字直交多項式が得られている[21]．他にも，量子二重対数関数が現れる $|q|=1$ のアスキー・ウィルソン多項式や，無反射ポテンシャルの構成法などの話題がある．これらの話題に関しては佐々木氏が最近書かれた本[22] が参考になろう．

直交多項式は数学・物理学に留まらず工学などの様々な分野に現れてくるが，それを多添字直交多項式に置き換える事で新しい可能性が開ける事を期待している．

多くの共同研究を行い，本原稿にもコメントを頂いた，佐々木隆氏に感謝致します．

6. *

参考文献

1) 岩波数学辞典 (第 4 版), 日本数学会編集, 岩波書店 (2007) 186.
2) M. M. Crum: Quart. J. Math. Oxford Ser. (2) **6** (1955) 121, arXiv:physics/9908019.
3) G. Darboux: *Théorie générale des surfaces* vol 2 (1888) Gauthier-Villars, Paris.
4) M. G. Krein: Doklady Acad. Nauk. CCCP **113** (1957) 970; V. É. Adler: Theor. Math. Phys. **101** (1994) 1381.
5) S. Odake and R. Sasaki: J. Math. Phys. **47** (2006) 102102; Phys. Lett. **B641** (2006) 112.
6) 例えば, F. Cooper, A. Khare and U. Sukhatme: Phys. Rep. **251** (1995) 267.
7) M. E. H. Ismail: *Classical and Quantum Orthogonal Polynomials in One Variable*, Cambridge Univ. Press, Cambridge (2005).
8) E. Routh: Proc. London Math. Soc. **16** (1884) 245; S. Bochner: Math. Zeit. **29** (1929) 730.
9) R. Koekoek, P. A. Lesky and R. F. Swarttouw: *Hypergeometric orthogonal polynomials and their q-analogues,* Springer-Verlag (2010).
10) D. Gómez-Ullate, N. Kamran and R. Milson: J. Approx. Theory **162** (2010) 987; J. Math. Anal. Appl. **359** (2009) 352.
11) C. Quesne: J. Phys. **A41** (2008) 392001.
12) S. Odake and R. Sasaki: Phys. Lett. **B679** (2009) 414; Phys. Lett. **B684** (2010) 173.
13) C.-L. Ho, S. Odake and R. Sasaki: SIGMA **7** (2011) 107.
14) D. Gómez-Ullate, N. Kamran and R. Milson: J. Phys. **A43** (2010) 434016; R. Sasaki, S. Tsujimoto and A. Zhedanov: J. Phys. **A43** (2010) 315204.
15) D. Gómez-Ullate, N. Kamran and R. Milson: J. Math. Anal. Appl. **387** (2012) 410.
16) S. Odake and R. Sasaki: Phys. Lett. **B702** (2011) 164.
17) S. Odake and R. Sasaki: J. Phys. **A46** (2013) 235205; J. Phys. **A46** (2013) 245201.
18) S. Odake and R. Sasaki: J. Phys. **A44** (2011) 353001.
19) S. Odake: J. Math. Phys. **55** (2014) 013502; K. Takemura: J. Math. Phys. **55** (2014) 113501.
20) S. Odake: J. Math. Phys. **54** (2013) 083506; J. Math. Phys. **56** (2015) 053506; arXiv:1509.08213[math-ph]; H. Miki and S. Tsujimoto: J. Math. Phys. **56** (2015) 033502; D. Gómez-Ullate, Y. Grandati and R. Milson: J. Phys. **A47** (2014) 015203; D. Gómez-Ullate, A. Kasman, A. B. J. Kuijlaars and R. Milson: arXiv:1506.03651[math.CA].
21) S. Odake and R. Sasaki: Phys. Lett. **B682** (2009) 130; Prog. Theor. Phys. **125** (2011) 851; J. Phys. **A 45** (2012) 385201; J. Phys. **A46** (2013) 045204.
22) 佐々木隆: SGC ライブラリ-1??「タイトル未定」, サイエンス社 (2016 年 3 月頃出版予定).

著者紹介または非会員著者の紹介

小竹悟氏： 専門は素粒子論・数理物理学．2 次元共形場理論の無限次元対称性などを扱っていたが，近年は 1 次元量子力学系の研究．

(2015 年 12 月 7 日原稿受付)

Exactly Solvable Quantum Mechanics and Orthogonal Polynomials

Satoru Odake

abstract: We review recent developments of exactly solvable quantum mechanical systems and orthogonal polynomials. The first topic is a natural construction of creation and annihilation operators, which are obtained from the Heisenberg solution of the sinusoidal coordinate satisfying the closure relation. The second topic is a new kind of orthogonal polynomials: exceptional orthogonal polynomials, multi-indexed orthogonal polynomials. They form a complete set of the weighted Hilbert space in spite of the fact that they have missing degrees. Various multi-indexed orthogonal polynomials have been obtained from the study of exactly solvable quantum mechanical systems.

amsmath パッケージを用いた副作用により，中身の無い§6 が現れている．

1 ページ目の右側に入る Keywords だが，そのやり方が分からないので，ここに記す．

解ける量子力学模型：
本解説では 1 次元 1 自由度のシュレディンガー方程式の束縛状態を扱い，エネルギー固有値 $\mathcal{E}_n$ と固有関数 $\phi_n(x)$ が具体的に求まっている場合を指す．

前方・後方ずらし関係式：
直交多項式 P_n に微分演算子 (差分演算子) を掛けて $P_{n\pm1}$ を得る関係式．但し $P_{n\pm1}$ のパラメータは P_n のものからずれている．

形状不変性：
量子力学模型が解けるための十分条件の 1 つ．

生成消滅演算子：
場の量子論などでは文字通り粒子を生成・消滅させる働きを持つ演算子だが，ここでは固有関数 $\phi_n(x)$ を $\phi_{n\pm1}(x)$ に変える演算子．調和振動子以外の解ける模型に対して，その自然な構成法が 2006 年に見い出された．

新しい種類の直交多項式：
次数に欠落があるにも拘らず完全系をなす直交多項式．2008 年の発見以降精力的に研究が行われ，2 階微分方程式 (差分方程式) を満たす古典直交多項式を基に構成され，やはり 2 階微分方程式 (差分方程式) を満たしている．例外直交多項式，多添字直交多項式と呼ばれている．