

水素原子の回転楕円体座標変数分離解

adhara*

2018年5月12日

概要

本ノートでは非相対論的水素原子の Schrödinger 方程式の回転楕円体座標変数分離による解法を紹介する。本ノートを書くにあたり T. Kereselidze, et al. (2016) ^{*1} と竹村剛一 (2014) ^{*2} を参考にしている。

* [Twitter @adhara_mathphys](#)

*1 [Kereselidze, T., Chkadua, G., Defrance, P., & Ogilvie, J. F. \(2016\). Derivation, properties and application of Coulomb Sturmians defined in spheroidal coordinates. *Molecular Physics*, 114\(1\), 148-161.](#)

*2 [竹村剛一 "Heun's differential equation and quantum mechanics" 数理解析研究所講究録 \(2014\), 1902: 102-114.](#)

目次

1	問題設定	3
2	回転楕円体座標の導入	3
3	ラプラシアン of 回転楕円体座標表示	6
4	Schrödinger 方程式変数分離の実行	9
5	合流型 Heun の微分方程式	12
5.1	Heun の微分方程式	12
5.2	合流型 Heun 微分方程式	13
5.3	式 20,21 が合流型 Heun の微分方程式になること	14
5.4	合流型 Heun 微分方程式を解く	15
6	エネルギーの縮重度	19

1 問題設定

非相対論的水素様原子に対する Schrödinger 方程式、

$$\begin{aligned} H\Psi(\mathbf{r}) &= \left[-\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{Z}{r} \right] \Psi(\mathbf{r}) \\ &= \left[-\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla^2 - \frac{\kappa}{r} \right] \Psi(\mathbf{r}) \\ &= E\Psi(\mathbf{r}) \end{aligned} \tag{1}$$

から束縛状態のスペクトルと波動関数を求めることを考える。すなわち、式 1 においては $E < 0$ の解を求めるものとする。

2 回転楕円体座標の導入

z 軸が回転軸となる回転楕円体座標を考える。すなわち、楕円の焦点が z 軸にある状況を考える。楕円の焦点のうちの一つは原点に設定し、もう一つの焦点は $(0, 0, R)$ とする。焦点間の距離 R は回転楕円体座標系を定めるパラメータである。この R を変えるごとに異なる座標系を得られる。この $R \rightarrow 0$ の極限が球座標に $R \rightarrow \infty$ の極限が放物線座標に相当する。

まずデカルト座標で $\mathbf{r} = (x, y, z)$ 球座標で (r, θ, ϕ) すな

わち、

$$\mathbf{r} = (x, y, z) = (r \sin \theta \cos \phi, r \sin \theta \sin \phi, r \cos \theta)$$

で表される点を考える。この点と二つの焦点 $\mathbf{0}$ と $(0, 0, R)$ の間の距離をそれぞれ r_1, r_2 とする。各点は方位角 ϕ と r_1, r_2 を用いて点を指定することができる。あるいは r_1, r_2 を用いて造られる二つのパラメータ

$$\xi = \frac{r_1 + r_2}{R}, \eta = \frac{r_1 - r_2}{R}$$

を用いることでも指定できる。この ϕ, ξ, η を用いるのが回転楕円体座標系である。図 1 のようになる。

方位角 ϕ の範囲は球座標に同じく

$$0 \leq \phi \leq 2\pi$$

となる。三角不等式 $r_1 + R \geq r_2, r_2 + R \geq r_1$ が成立することから η の範囲が

$$-1 \leq \eta \leq 1$$

と定まる。同じく三角不等式 $r_1 + r_2 \geq R$ より ξ の範囲が

$$\xi \geq 1$$

と定まる。ここで、 ξ, η はそれぞれ擬動径座標、擬角度座標と呼ばれる。

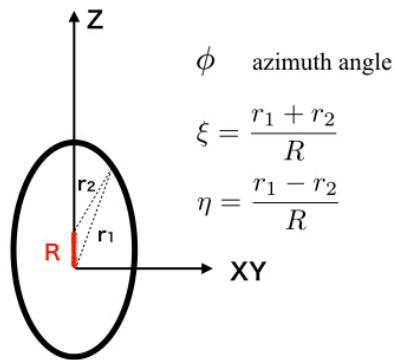


図 1 回転楕円体座標

回転楕円座標とデカルト座標や球座標の対応を考える。まず $r_1 = r$ であることに注意すると、

$$|\mathbf{r} - (0, 0, R)|^2 = r_2^2$$

$$\mathbf{r} \cdot (0, 0, R) = r_1 R \cos \theta$$

$$r_2^2 = r_1^2 - 2r_1 R \cos \theta + R^2$$

$$\cos \theta = \frac{r_1^2 - r_2^2 + R^2}{2r_1 R}$$

などとなる。したがって、 z 座標については

$$z = r_1 \cos \theta = \frac{r_1^2 - r_2^2 + R^2}{2R} = \frac{R}{2}(1 + \xi\eta)$$

となる。 x, y 座標については

$$\begin{aligned} x^2 + y^2 &= r_1^2 - z^2 \\ &= \left(\frac{R}{2}\right)^2 \{(\xi + \eta)^2 - (1 + \xi\eta)^2\} \\ &= \left(\frac{R}{2}\right)^2 (\xi^2 - 1)(1 - \eta^2) \end{aligned}$$

より、

$$x = \frac{R}{2} \sqrt{(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)} \cos \phi \quad (2)$$

$$y = \frac{R}{2} \sqrt{(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)} \sin \phi \quad (3)$$

となる。

3 ラプラシアン of 回転楕円体座標表示

回転楕円体座標系が直交座標系となることを示す。これを示すには $\mathbf{r} = (x, y, z)$ として、 $\frac{\partial \mathbf{r}}{\partial \xi}, \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial \eta}, \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial \phi}$ がそれぞれ直交す

ることを示す。それぞれ

$$\frac{\partial \mathbf{r}}{\partial \eta} = \begin{pmatrix} -\frac{\eta x}{1-\eta^2} \\ -\frac{\eta y}{1-\eta^2} \\ \frac{R\xi}{2} \end{pmatrix} \quad (4)$$

$$\frac{\partial \mathbf{r}}{\partial \xi} = \begin{pmatrix} \frac{\xi x}{1-\xi^2} \\ \frac{\xi y}{1-\xi^2} \\ \frac{R\eta}{2} \end{pmatrix} \quad (5)$$

$$\frac{\partial \mathbf{r}}{\partial \phi} = \begin{pmatrix} -y \\ x \\ 0 \end{pmatrix} \quad (6)$$

となるが、 $(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2) = (x^2 + y^2) \left(\frac{2}{R}\right)^2$ などを用いると容易に直交性が示せる。

直交座標系なので

$$h_\xi = \left| \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial \xi} \right| \quad (7)$$

$$h_\eta = \left| \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial \eta} \right| \quad (8)$$

$$h_\phi = \left| \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial \phi} \right| \quad (9)$$

とするとラプラシアンは

$$\begin{aligned} \nabla^2 = & \frac{1}{h_\xi h_\eta h_\phi} \left[\frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{h_\eta h_\phi}{h_\xi} \frac{\partial}{\partial \xi} \right) + \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\frac{h_\xi h_\phi}{h_\eta} \frac{\partial}{\partial \eta} \right) \right. \\ & \left. + \frac{\partial}{\partial \phi} \left(\frac{h_\eta h_\xi}{h_\phi} \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \right] \end{aligned} \quad (10)$$

と書くことができる。これに

$$\begin{aligned} h_\xi &= \sqrt{\frac{\xi^2 - \eta^2}{\xi^2 - 1} \frac{R}{2}} \\ h_\eta &= \sqrt{\frac{\xi^2 - \eta^2}{1 - \eta^2} \frac{R}{2}} \\ h_\phi &= \sqrt{(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)} \frac{R}{2} \end{aligned}$$

を代入すると、ラプラシアンは

$$\begin{aligned} \nabla^2 = & \frac{1}{(R/2)^2 (\xi^2 - \eta^2)} \left[\frac{\partial}{\partial \xi} \left((\xi^2 - 1) \frac{\partial}{\partial \xi} \right) \right. \\ & + \frac{\partial}{\partial \eta} \left((1 - \eta^2) \frac{\partial}{\partial \eta} \right) \\ & \left. + \frac{\xi^2 - \eta^2}{(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)} \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} \right] \end{aligned} \quad (11)$$

となる。

4 Schrödinger 方程式変数分離の実行

角度部分の依存性が $e^{im\phi}$ ($m \in \mathbb{Z}$) となるように変数分離できる。すなわち、

$$\Psi(\mathbf{r}) = \Phi_m(\xi, \eta)e^{im\phi} \quad (12)$$

とにおいて Schrödinger 方程式 1 を

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla^2 - \frac{\kappa}{r} \right] \Phi_m(\xi, \eta)e^{im\phi} = E \Phi_m(\xi, \eta)e^{im\phi} \quad (13)$$

とすることができる。 m は磁気量子数である。ラプラシアン
の回転楕円体座標表式 11 を用いると、

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{1}{(R/2)^2(\xi^2 - \eta^2)} \left[\frac{\partial}{\partial \xi} \left((\xi^2 - 1) \frac{\partial}{\partial \xi} \right) + \frac{\partial}{\partial \eta} \left((1 - \eta^2) \frac{\partial}{\partial \eta} \right) + \frac{(\xi^2 - \eta^2)(-m^2)}{(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)} \right] - \frac{2\kappa}{R(\xi + \eta)} - E \right\} \Phi_m(\xi, \eta) = 0 \quad (14)$$

となるが

$$A = \sqrt{-\frac{2m_e E}{\hbar^2}}, B = \sqrt{-\frac{\kappa^2 m_e}{2E \hbar^2}} \quad (15)$$

とすると、

$$\begin{aligned}
& \left\{ \frac{1}{(R/2)^2} \left[\frac{\partial}{\partial \xi} \left((\xi^2 - 1) \frac{\partial}{\partial \xi} \right) \right. \right. \\
& + \left. \frac{\partial}{\partial \eta} \left((1 - \eta^2) \frac{\partial}{\partial \eta} \right) - \frac{m^2}{1 - \eta^2} - \frac{m^2}{\xi^2 - 1} \right] \\
& \left. + \frac{4}{R} AB(\xi - \eta) - A^2(\xi^2 - \eta^2) \right\} \Phi_m = 0 \quad (16)
\end{aligned}$$

となり、

$$\begin{aligned}
& \left\{ \frac{\partial}{\partial \xi} \left((1 - \xi^2) \frac{\partial}{\partial \xi} \right) - \frac{m^2}{1 - \xi^2} - RAB\xi - \frac{R^2 A^2}{4} (1 - \xi^2) \right\} \Phi_m \\
& = \left\{ \frac{\partial}{\partial \eta} \left((1 - \eta^2) \frac{\partial}{\partial \eta} \right) - \frac{m^2}{1 - \eta^2} - RAB\eta - \frac{R^2 A^2}{4} (1 - \eta^2) \right\} \Phi_m \quad (17)
\end{aligned}$$

となる。ここで、

$$\Phi_m(\xi, \eta) = X_m(\xi)Y_m(\eta) \quad (18)$$

とにおいて式 17 の両辺を $X_m(\xi)Y_m(\eta)$ で割ったものは

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{X_m(\xi)} \left\{ \frac{d}{d\xi} \left((1 - \xi^2) \frac{d}{d\xi} \right) - \frac{m^2}{1 - \xi^2} - RAB\xi - \frac{R^2 A^2}{4} (1 - \xi^2) \right\} X_m(\xi) \\
& = \frac{1}{Y_m(\eta)} \left\{ \frac{d}{d\eta} \left((1 - \eta^2) \frac{d}{d\eta} \right) - \frac{m^2}{1 - \eta^2} - RAB\eta - \frac{R^2 A^2}{4} (1 - \eta^2) \right\} Y_m(\eta) \quad (19)
\end{aligned}$$

であり、 ξ, η によらない未定乗数 λ とおくことができる。

以上より、

$$\left[\frac{d}{d\xi} \left((1 - \xi^2) \frac{d}{d\xi} \right) - \frac{m^2}{1 - \xi^2} - RAB\xi - \frac{R^2 A^2}{4} (1 - \xi^2) - \lambda \right] X_m(\xi) = 0 \quad (20)$$

$$\left[\frac{d}{d\eta} \left((1 - \eta^2) \frac{d}{d\eta} \right) - \frac{m^2}{1 - \eta^2} - RAB\eta - \frac{R^2 A^2}{4} (1 - \eta^2) - \lambda \right] Y_m(\eta) = 0 \quad (21)$$

という擬動径座標と擬角度座標の二つの式に帰着する。特筆べき点として両者は定義域は違うが形式上は同じ微分方程式となる。

微分方程式 20、21 は、

$$\left[\frac{d}{dz} \left((1 - z^2) \frac{d}{dz} \right) - \frac{m^2}{1 - z^2} - A' - B'z - C'z^2 \right] Z_m(z) = 0 \quad (22)$$

という形式をとっている。上方程式で $A' = B' = 0$ とした時には、この方程式は Legendre 陪微分方程式に相当する。さらに $m = 0$ を課せば Legendre 微分方程式となる。この方程式の正体については次節で詳しく論じる。

5 合流型 Heun の微分方程式

5.1 Heun の微分方程式

次の方程式は Heun の微分方程式と呼ばれる。

$$\left[\frac{d^2}{dz^2} + \left(\frac{\gamma}{z} + \frac{\delta}{z-1} + \frac{\epsilon}{z-t} \right) \frac{d}{dz} + \frac{\alpha\beta z - q}{z(z-1)(z-t)} \right] Z(z) = 0 \quad (23)$$

ただし、 $\alpha, \beta, \gamma, \delta, \epsilon, q, t$ は z に依存しないパラメータであり、

$$\gamma + \delta + \epsilon = \alpha + \beta + 1 \quad (24)$$

が要請されるものとする。本微分方程式を Riemann 球面 $\mathbb{C} \cup \{\infty\}$ 上で考えると、四つの特異点 $\{0, 1, t, \infty\}$ は全て確定特異点であることがわかる。したがって、Heun 微分方程式は特異点が全て確定特異点となる二階常微分方程式であり Fuchs 型に分類される。同様に Fuchs 型に分類される超幾何微分方程式は三つの特異点 $\{0, 1, \infty\}$ が全て確定特異点となるものである。超幾何微分方程式は

$$\left[\frac{d^2}{dz^2} + \left(\frac{\gamma}{z} + \frac{\alpha + \beta - \gamma + 1}{z-1} \right) \frac{d}{dz} + \frac{\alpha\beta}{z(z-1)} \right] Z(z) = 0 \quad (25)$$

という形のものである。Heun の微分方程式は Riemann 球面上 4 つの確定特異点がある方程式の標準形となる、とのことである。また、超幾何微分方程式と比較して難しいとされる原因はアクセサリパラメータと呼ばれる q の存在による、とのことである。

5.2 合流型 Heun 微分方程式

特異点 $z = 1$ を $z = \infty$ に合流させることで超幾何微分方程式から合流型超幾何微分方程式を導けるように、Heun 微分方程式についても特異点 $z = t$ を $z = \infty$ に合流させることで合流型 Heun 微分方程式を作ることができる。すなわち、 $\epsilon = -4pt$, $\beta = -4pt + \delta + \gamma - \alpha - 1$, $q = -\sigma t$ として、 $t \rightarrow \infty$ とすると

$$\left[\frac{d^2}{dz^2} + \left(4p + \frac{\gamma}{z} + \frac{\delta}{z-1} \right) \frac{d}{dz} + \frac{4p\alpha z - \sigma}{z(z-1)} \right] Z(z) = 0 \quad (26)$$

となる。この形の方程式を合流型 Heun 微分方程式と呼ぶ。この操作において $z = 0, 1$ は確定特異点のままとなるが、合流によってできる新たな特異点 $z = \infty$ は不確定特異点となる。

変数変換 $w = 2z - 1$ を行なった式は

$$\left[(w^2 - 1) \frac{d^2}{dw^2} + (2p(w^2 - 1) + (\gamma + \delta)w + \delta - \gamma) \frac{d}{dw} + 2p\alpha(w + 1) - \sigma \right] Z \left(\frac{w + 1}{2} \right) = 0 \quad (27)$$

となる。

5.3 式 20,21 が合流型 Heun の微分方程式になること

式 20,21 を合流型 Heun の微分方程式に帰着させることが可能である。すなわち $w \geq 1$ のときに

$$\tilde{H}(w) = (w^2 - 1)^{\frac{-|m|}{2}} e^{\frac{RA}{2}w} X_m(w) \quad (28)$$

、 $-1 \leq w \leq 1$ のときに

$$\tilde{H}(w) = (1 - w^2)^{\frac{-|m|}{2}} e^{\frac{RA}{2}w} Y_m(w) \quad (29)$$

とおくと

$$\left[(w^2 - 1) \frac{d^2}{dw^2} + (-RA(w^2 - 1) + 2(|m| + 1)w) \frac{d}{dw} - RA(|m| + 1 - B)w + \lambda + |m|(|m| + 1) \right] \tilde{H}(w) = 0 \quad (30)$$

となる。さらに変数変換 $w = 2z - 1$ を行くと、

$$\left[\frac{d^2}{dz^2} + \left(-2RA + \frac{|m| + 1}{z} + \frac{|m| + 1}{z - 1} \right) \frac{d}{dz} + \frac{-2RA(|m| + 1 - B)z + \lambda + |m|(|m| + 1) + RA(|m| + 1 - B)}{z(z - 1)} \right] \tilde{H}(2z - 1) = 0 \quad (31)$$

という合流型 Heun 微分方程式になる。

以上より、未定乗数 λ と B を境界条件などから定めることができれば (A は B から定まるので) 合流型 Heun 微分方程式の解を用いて式 20,21 の解を書けることがわかった。

5.4 合流型 Heun 微分方程式を解く

最初に合流型 Heun 方程式の一般形 26

$$\left[\frac{d^2}{dz^2} + \left(4p + \frac{\gamma}{z} + \frac{\delta}{z - 1} \right) \frac{d}{dz} + \frac{4p\alpha z - \sigma}{z(z - 1)} \right] Z(z) = 0$$

を級数解法により解くことを考える。すなわち、

$$Z(z) = \sum_{i=0}^{\infty} a_i z^i, \quad (32)$$

とおく。^{*3}すると、係数比較により

$$-\sigma a_0 = \gamma a_1 \tag{33}$$

と

$$\begin{aligned} 0 = & [i(i-1 + \gamma + \delta - 4p) - \sigma] a_i \\ & - (i+1)(i+\gamma) a_{i+1} \\ & + 4p(i-1 + \alpha) a_{i-1} \quad (i \geq 1) \end{aligned} \tag{34}$$

が要請される。

ここで解が無級数で表されるとき

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{a_i}{a_{i-1}} = 1 \tag{35}$$

となるが、このような解を Schrödinger で用いると $z \rightarrow \infty$ で発散する。したがって、合流型 Heun 方程式の解としては多項式となるものを考える。

■ $a_0 \neq 0, a_1 = a_2 = \dots = 0$ となる多項式解 (次数 0)

このための必要条件は

$$\sigma = \alpha = 0 \tag{36}$$

である。

^{*3} 非負整数のべきに限る理由については保留

Schrödinger 方程式に対応したものとするために、合流型 Heun 方程式中の各パラメータとして

$$\begin{aligned}\sigma &= -\lambda - |m|(|m| + 1) - RA(|m| + 1 - B) \\ \alpha &= |m| + 1 - B \\ \gamma &= \delta = |m| + 1 \\ p &= -\frac{RA}{2}\end{aligned}$$

を代入すると、

$$B = |m| + 1, \rho = 0, \lambda = -|m|(|m| + 1) \quad (37)$$

を得る。対応するエネルギーは

$$E = -\frac{\kappa^2}{2(|m| + 1)^2} \frac{m_e}{\hbar^2} \quad (38)$$

■ $n \geq 1, a_n \neq 0, a_{n+1} = a_{n+2} = \dots = 0$ の多項式解 (次数 n)

このための必要条件は

$$\begin{aligned}0 &= 4p(n + \alpha) \\ 0 &= [n(n - 1 + \gamma + \delta - 4p) - \sigma] a_n - 4pa_{n-1}\end{aligned} \quad (39)$$

である。

Schrödinger 方程式に対応したものとするために、合流型 Heun 方程式中の各パラメータとして

$$\begin{aligned}\sigma &= -\lambda - |m|(|m| + 1) - RA(|m| + 1 - B) \\ \alpha &= |m| + 1 - B \\ \gamma &= \delta = |m| + 1 \\ p &= -\frac{RA}{2}\end{aligned}$$

を代入すると、

$$B = n + |m| + 1 \quad (40)$$

と

$$[RA(B - (|m| + 1)) + \lambda + B(B - 1)] a_n + 2RAa_{n-1} = 0 \quad (41)$$

を得る。対応するエネルギーは

$$E = -\frac{\kappa^2}{2(n + |m| + 1)^2} \frac{m_e}{\hbar^2} \quad (42)$$

式 33 にパラメータを代入すると

$$-\sigma a_0 = \gamma a_1 \quad (43)$$

、式 34 にパラメータを代入すると

$$\begin{aligned} 0 &= [i(i-1+\gamma+\delta-4p) - \sigma] a_i \\ &\quad - (i+1)(i+\gamma) a_{i+1} \\ &\quad + 4p(i-1+\alpha) a_{i-1} \quad (1 \leq i \leq n-1) \end{aligned} \quad (44)$$

となるが、これらと式 41 を連立させてできる、 (a_0, a_1, \dots, a_n) に関する $(n+1)$ 元連立一次方程式が非自明な解を持つ条件あるいは永年方程式から λ は求まる。永年方程式は λ の $n+1$ 次方程式となり、 $n+1$ の相異なる実数解を持つ。^{*4} こうして各磁気量子数 m について得られる $n+1$ 種類の状態はエネルギーが同一となって縮退した状態である。固有ベクトルを係数とする多項式を用いて波動関数を書き下すことができる。

6 エネルギーの縮重度

エネルギーが主量子数 $N \in \mathbb{Z}_{>0}$ を用いて

$$E = -\frac{\kappa^2}{2N^2} \frac{m_e}{\hbar^2} \quad (45)$$

で与えられる状態の縮重度（スピンは含まず）を求める。このエネルギーを取りうる状態の磁気量子数 m の範囲は

$$-(N-1) \leq m \leq N-1 \quad (46)$$

^{*4} 本当に相異なる実数解が生じるかどうかについては別の機会に。

である。各 m について方程式の次数 $n(m, N)$ は

$$n(m, N) = N - |m| - 1 \quad (47)$$

で与えられる。磁気量子数 m に対して主量子数 N の状態は $n(m, N) + 1$ 個あるので、主量子数 N の状態の縮重度は、

$$\begin{aligned} \sum_{m=-(N-1)}^{N-1} (n(m, N) + 1) &= \sum_{m=-(N-1)}^{N-1} (N - |m|) \\ &= N(2N - 1) - N(N - 1) \\ &= N^2 \end{aligned} \quad (48)$$

となる。

付録 合流型 Heun 微分方程式から Schrödinger 方程式への変換

合流型 Heun 微分方程式の変形バージョンである式 27

$$\left[(w^2 - 1) \frac{d^2}{dw^2} + (2p(w^2 - 1) + (\gamma + \delta)w + \delta - \gamma) \frac{d}{dw} + 2p\alpha(w + 1) - \sigma \right] Z\left(\frac{w+1}{2}\right) = 0$$

を考える。さらに $w \geq 1$ あるいは $z \geq 1$ のときに

$$Z\left(\frac{w+1}{2}\right) = (w^2 - 1)^{\frac{-|m|}{2}} W(w) \quad (49)$$

、 $-1 \leq w \leq 1$ あるいは $0 \leq z \leq 1$ のときに

$$Z\left(\frac{w+1}{2}\right) = (1 - w^2)^{\frac{-|m|}{2}} W(w) \quad (50)$$

とおくと両方の場合に

$$\begin{aligned} & \left[(w^2 - 1) \frac{d^2}{dw^2} + (2pw^2 + (\gamma + \delta - 2|m|)w - \gamma + \delta - 2p) \frac{d}{dw} \right. \\ & + 2p(\alpha - |m|)w + 2p\alpha - \sigma + |m|(|m| + 1 - \gamma - \delta) \\ & \left. + \frac{|m|(|m| + 2 - \gamma - \delta)}{w^2 - 1} + \frac{|m|w(\gamma - \delta)}{w^2 - 1} \right] W(w) = 0 \end{aligned} \quad (51)$$

という方程式になる。加えて

$$W(w) = e^{sw} U(w) \quad (52)$$

とおくと、

$$\begin{aligned}
& \left[(w^2 - 1) \frac{d^2}{dw^2} \right. \\
& + (2(p + s)w^2 + (\gamma + \delta - 2|m|)w - \gamma + \delta - 2(p + s)) \frac{d}{dw} \\
& + s(s + 2p)w^2 \\
& + (2p(\alpha - |m|) + s(\gamma + \delta - 2|m|))w \\
& + 2p\alpha - \sigma + |m|(|m| + 1 - \gamma - \delta) - s^2 + s(-\gamma + \delta - 2p) \\
& \left. + \frac{|m|(|m| + 2 - \gamma - \delta)}{w^2 - 1} + \frac{|m|w(\gamma - \delta)}{w^2 - 1} \right] W(w) = 0 \quad (53)
\end{aligned}$$

ここで $\delta = \gamma = |m| + 1, s = -p$ を課して

$$q = \alpha - |m| - 1 \quad (54)$$

$$\tau = 2p(|m| + 1 + q) - \sigma - |m|(|m| + 1) \quad (55)$$

を導入する。

$$\left[\frac{d}{dw} \left((1 - w^2) \frac{d}{dw} \right) - p^2(1 - w^2) - 2pqw - \tau - \frac{m^2}{1 - w^2} \right] W(w) = 0 \quad (56)$$

ここで例えば

$$p = -\frac{RA}{2} \quad (57)$$

$$q = -B \quad (58)$$

$$\tau = \lambda \quad (59)$$

とおけば、変数の範囲も含めて式 20,21 と同じ形の方程式

$$\left[\frac{d}{d\eta} \left((1-w^2) \frac{d}{dw} \right) - \frac{m^2}{1-w^2} - RABw - \frac{R^2 A^2}{4} (1-w^2) - \lambda \right] W(w) = 0$$

を得る。