水素様原子シュレディンガー方程式のフォックによる解法

adhara*

2018 年 9 月 25 日

1　はじめに

フォックの解法は水素様原子のハミルトニアン、

$$H = -\frac{\hbar^2 \Delta}{2m_e} - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 x} = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m_e} - \frac{\kappa}{x} \tag{1}$$

に対するシュレディンガー方程式

$$\left\{ \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m_e} - \frac{\kappa}{x} - E \right\} \psi(\boldsymbol{x}) = 0 \tag{2}$$

* Twitter @adhara_mathphys

をフーリエ変換し、運動量表示の波動関数を考えることを特徴とする。

本ノートではフォックの解法を D 次元に拡張した問題を解く。（D 次元に拡張したものもここではフォックの解法と呼ぶ。）この方法は Bander と Itzykson のレビュー論文で紹介されている。

■D 次元の問題の定義

一般の D 次元（$D \geq 2$）の水素様原子における電子のハミルトニアンの束縛状態エネルギースペクトルを求める問題を考える。すなわち、ハミルトニアン中のラプラシアン Δ や $\frac{1}{x}$ を

$$\Delta = \sum_{i=1}^{D} \frac{\partial^2}{\partial x_i^2},\ x = \sqrt{\sum_{i=1}^{D} x_i^2} \tag{3}$$

に読み替えた固有値問題を考える。ただし $\frac{1}{x}$ というポテンシャルは $D = 3$ 以外ではガウスの法則を満たさないので、電荷相互作用由来のポテンシャルとは言い難い。フーリエ変換も D 次元で行う。

別のノートで導出したように、関数 $\psi(\boldsymbol{x})$ のフーリエ変換を

$$\begin{aligned}\tilde{\psi}(\boldsymbol{p}) &:= F\left[\psi(\boldsymbol{x})\right](\boldsymbol{p}) \\ &:= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{D}{2}}} \int_{\boldsymbol{R}^D} d\boldsymbol{x}\ \psi(\boldsymbol{x}) \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{p}\right)\end{aligned} \tag{4}$$

で定義したときに、式 2 のフーリエ変換は

$$\left\{\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m_e}-E\right\}\tilde{\psi}(\boldsymbol{p})=\frac{\kappa}{\pi S_{D-2}\hbar}\int_{\boldsymbol{R}^D}d\boldsymbol{p}'\frac{\tilde{\psi}(\boldsymbol{p}')}{|\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}'|^{D-1}} \tag{5}$$

となる。別のノートで導出している D 次元空間中の単位超球 S^{D-1} の表面積の公式

$$S_{D-1}=\frac{2\pi^{D/2}}{\Gamma\left(\frac{D}{2}\right)}$$

を用いている。

この方程式 5 を出発点として、考える。

$$p_0^2=-2m_eE<0 \tag{6}$$

とする。（$p_0>0$ とする。）

$$(\boldsymbol{p}^2+p_0^2)\tilde{\psi}(\boldsymbol{p})=\frac{2m_e\kappa}{\pi S_{D-2}\hbar}\int_{\boldsymbol{R}^D}d\boldsymbol{p}'\frac{\tilde{\psi}(\boldsymbol{p}')}{|\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}'|^{D-1}} \tag{7}$$

と変形できる。

2　S^D 上積分への変数変換

2.1　変数変換の導入

$\boldsymbol{R}^D$ 上のベクトル $\boldsymbol{p}$ を $\boldsymbol{R}^{D+1}$ に埋め込む。すなわち、

$$\boldsymbol{u}=\frac{p_0^2-\boldsymbol{p}^2}{\boldsymbol{p}^2+p_0^2}\boldsymbol{n}+\frac{2p_0}{\boldsymbol{p}^2+p_0^2}\boldsymbol{p} \tag{8}$$

によって、$\boldsymbol{R}^{D+1}$ 上のベクトル $\boldsymbol{p}$ を導入する。これにより新たな直交基底ベクトル $\boldsymbol{n}$ が加わったことになる。当然 $\boldsymbol{n} \perp \boldsymbol{p}$ が成立する。

ここで、

$$|\boldsymbol{u}| = 1 \tag{9}$$

となっているので、

$$\boldsymbol{u} \in S^D \tag{10}$$

である。

この変換は $\boldsymbol{R}^D$ から S^D への「ほぼ」一対一への変換となっている。（$|\boldsymbol{p}| \to \infty$ のとき、$\boldsymbol{u} \to -\boldsymbol{n}$ となる。$-\boldsymbol{n}$ だけ特異点となる。）すなわち、上記の置換により S^D 上の積分 $\int_{S^D} d\Omega_D$ にすることが出来る。（以下、$|\boldsymbol{u}| = 1$ のときは S^D 上の変数であることを強調して Ω_D と書いたり、$(1, \Omega_D)$ と書いたりする。）

このとき、

$$d\Omega_D = \left(\frac{2p_0}{\boldsymbol{p}^2 + p_0^2} \right)^D d\boldsymbol{p} \tag{11}$$

$$|\boldsymbol{p} - \boldsymbol{p}'|^2 = \frac{(\boldsymbol{p}^2 + p_0^2)(\boldsymbol{p}'^2 + p_0^2)}{(2p_0)^2} |\boldsymbol{u} - \boldsymbol{u}'|^2 \tag{12}$$

が成立する。（付録を参照）ただし、

$$\boldsymbol{u}' = \frac{p_0^2 - \boldsymbol{p}'^2}{\boldsymbol{p}'^2 + p_0^2}\boldsymbol{n} + \frac{2p_0}{\boldsymbol{p}'^2 + p_0^2}\boldsymbol{p}' \tag{13}$$

である。

　これらを用いると、

$$\begin{aligned}
&(p^2 + p_0^2)\tilde{\psi}(\boldsymbol{p}) \\
&= \frac{2m_e\kappa}{\pi S_{D-2}\hbar}\int_{S^D} d\Omega'_D \left(\frac{p_0^2 + p'^2}{2p_0}\right)^D \\
&\times \frac{1}{|\boldsymbol{u} - \boldsymbol{u}'|^{D-1}} \frac{(2p_0)^{D-1}}{(p_0^2 + p^2)^{\frac{D-1}{2}}(p_0^2 + p'^2)^{\frac{D-1}{2}}}\tilde{\psi}(\boldsymbol{p}')
\end{aligned}$$

という式に帰着する。

　ここで、

$$\Psi(\Omega_D) = \sqrt{\frac{S_D}{p_0}}\left(\frac{p_0^2 + p^2}{2p_0}\right)^{\frac{D+1}{2}}\tilde{\psi}(\boldsymbol{p}) \tag{14}$$

を導入すると、

$$\Psi(\Omega_D) = \frac{2m_e\kappa}{2p_0\pi S_{D-2}\hbar}\int_{S^D} d\Omega'_D \frac{\Psi(\Omega'_D)}{|\boldsymbol{u} - \boldsymbol{u}'|^{D-1}} \tag{15}$$

となる。

　式 15 において積分内部にラプラシアン $\Delta_{\boldsymbol{R}^{D+1}}$ についてのグリーン関数が表れていることが分かる。次節でグリーン関数を用いた書き直しを行う。

2.2 Laplacian とグリーン関数

別のノートで示したように、

$$\Delta_{\boldsymbol{u},\boldsymbol{R}^{D+1}}\frac{1}{(D-1)S_D|\boldsymbol{u}-\boldsymbol{u}'|^{D-1}}=-\delta(\boldsymbol{u}-\boldsymbol{u}') \tag{16}$$

となる。ただし $\Delta_{\boldsymbol{u},\boldsymbol{R}^{D+1}}$ は $\boldsymbol{u}$ による微分、$\boldsymbol{R}^{D+1}$ 上のラプラシアンであることを意味している。すなわち、

$$G(\boldsymbol{u}-\boldsymbol{u}')=\frac{1}{(D-1)S_D|\boldsymbol{u}-\boldsymbol{u}'|^{D-1}} \tag{17}$$

は $\Delta_{\boldsymbol{u},\boldsymbol{R}^{D+1}}$ に対するグリーン関数である。

これを用いて、式 15 は

$$\Psi(\Omega_D)=\frac{2m_e\kappa(D-1)S_D}{2p_0\pi S_{D-2}\hbar}\int_{S^D}d\Omega'_D\Psi(\Omega'_D)G(\boldsymbol{u}-\boldsymbol{u}') \tag{18}$$

となるが、$S_D=\frac{2\pi^{\frac{D+1}{2}}}{\Gamma\left(\frac{D+1}{2}\right)}$、$S_{D-2}=\frac{2\pi^{\frac{D-1}{2}}}{\Gamma\left(\frac{D-1}{2}\right)}$ を用いれば、

$$\frac{S_D}{S_{D-2}}=\frac{2\pi}{D-1} \tag{19}$$

となり、

$$\Psi(\Omega_D)=\frac{2m_e\kappa}{p_0\hbar}\int_{S^D}d\Omega'_D\Psi(\Omega'_D)G(\boldsymbol{u}-\boldsymbol{u}') \tag{20}$$

という問題に帰着する。

実は、この解が $D+1$ 次元における球面調和関数 $Y_{n\alpha}(\Omega_D)$ であることと、$\frac{2m_e\kappa}{p_0\hbar}$、が球面調和関数の指数 n によって定まることが示せる。これを示すために以下では、

$$\int_{S^D} d\Omega'_D Y(\Omega'_D) G(\boldsymbol{u}-\boldsymbol{u}') \tag{21}$$

の評価を行うのだが、いくつかの準備が必要である。

2.3 Laplacian、Laplace-Beltrami 演算子と球面調和関数

別のノートで示したように超球 S^D 上の Laplace-Beltrami 演算子 Δ_{S^D} の固有状態は球面調和関数 $Y_{n\alpha}$ であり、

$$\Delta_{S^D} Y_{n\alpha}(\Omega_D) = -n(n+D-1) Y_{n\alpha}(\Omega_D) \tag{22}$$

となる。（n は非負整数、縮重度は ${}_{n+D}C_n - {}_{n+D-2}C_{n-2}$）

また、Laplace-Beltrami 演算子 Δ_{S^D} と Laplacian $\Delta_{\boldsymbol{u},\boldsymbol{R}^{D+1}}$ の関係は、

$$\Delta_{\boldsymbol{u},\boldsymbol{R}^{D+1}} = \frac{1}{u^D}\frac{\partial}{\partial u}\left(u^D \frac{\partial}{\partial u}\right) + \frac{\Delta_{S^D}}{u^2} \tag{23}$$

これを用いると、

$$\Delta_{\boldsymbol{u},\boldsymbol{R}^{D+1}} u^n Y_{n\alpha}(\Omega_D) = 0 \tag{24}$$

$$\Delta_{\boldsymbol{u},\boldsymbol{R}^{D+1}} u^{-n-D+1} Y_{n\alpha}(\Omega_D) = 0 \tag{25}$$

が成立することが分かる。このうち、原点付近で発散しないのは $u^n Y_{n\alpha}$ の方である。以下、

$$\tilde{Y}_{n\alpha}(\boldsymbol{u}) := u^n Y_{n\alpha}(\Omega_D) \tag{26}$$

とする。

2.4 留数計算の高次元版のようなテクニック

$\boldsymbol{u} \in S^D \subset \boldsymbol{R}^{D+1}$ とする。（すなわち $|\boldsymbol{u}| = 1$）ここで

$$S_\epsilon = S_\epsilon^{(1)} \bigcup S_\epsilon^{(2)} \tag{27}$$

$$S_\epsilon^{(1)} = \left\{ \boldsymbol{u}' \in \boldsymbol{R}^{D+1} |\ |\boldsymbol{u}'| = 1, |\boldsymbol{u} - \boldsymbol{u}'| \geq \epsilon \right\} \tag{28}$$

$$S_\epsilon^{(2)} = \left\{ \boldsymbol{u}' \in \boldsymbol{R}^{D+1} |\ |\boldsymbol{u}'| \leq 1, |\boldsymbol{u} - \boldsymbol{u}'| = \epsilon \right\} \tag{29}$$

という $\boldsymbol{R}^{D+1}$ 内の部分空間を考える。$\epsilon \to +0$ のとき、

$$S_\epsilon^{(1)} \to S^D \tag{30}$$

となることを留意する。

このとき以下の式が、ガウスの定理と式 16、24 を用いると

導出できる。

$$
\begin{aligned}
&\int_{S_\epsilon} d\boldsymbol{S}' \cdot \left\{\tilde{Y}_{n\alpha}(\boldsymbol{u}')\nabla_{\boldsymbol{u}'}G(\boldsymbol{u}-\boldsymbol{u}') - G(\boldsymbol{u}-\boldsymbol{u}')\nabla_{\boldsymbol{u}'}\tilde{Y}_{n\alpha}(\boldsymbol{u}')\right\} \\
&= \int_{V_\epsilon} dV'\nabla_{\boldsymbol{u}'}\left\{\tilde{Y}_{n\alpha}(\boldsymbol{u}')\nabla_{\boldsymbol{u}'}G(\boldsymbol{u}-\boldsymbol{u}') - G(\boldsymbol{u}-\boldsymbol{u}')\nabla_{\boldsymbol{u}'}\tilde{Y}_{n\alpha}(\boldsymbol{u}')\right\} \\
&= \int_{V_\epsilon} dV'\left\{\tilde{Y}_{n\alpha}(\boldsymbol{u}')\Delta_{\boldsymbol{u}'}G(\boldsymbol{u}-\boldsymbol{u}') - G(\boldsymbol{u}-\boldsymbol{u}')\Delta_{\boldsymbol{u}'}\tilde{Y}_{n\alpha}(\boldsymbol{u}')\right\} \\
&= 0
\end{aligned}
\tag{31}
$$

となる。ただし、V_ϵ は S_ϵ によって囲まれる部分、すなわち

$$
V_\epsilon = V \bigcap \overline{V_\epsilon^{(2)}} \tag{32}
$$

$$
V = \left\{\boldsymbol{u}' \in \boldsymbol{R}^{D+1} |\ |\boldsymbol{u}'| \leq 1\right\} \tag{33}
$$

$$
V_\epsilon^{(2)} = \left\{\boldsymbol{u}' \in \boldsymbol{R}^{D+1} |\ |\boldsymbol{u}-\boldsymbol{u}'| < \epsilon\right\} \tag{34}
$$

である。

以上より、

$$
\begin{aligned}
&\int_{S_\epsilon^{(1)}} d\boldsymbol{S}' \cdot \left\{\tilde{Y}_{n\alpha}(\boldsymbol{u}')\nabla_{\boldsymbol{u}'}G(\boldsymbol{u}-\boldsymbol{u}') - G(\boldsymbol{u}-\boldsymbol{u}')\nabla_{\boldsymbol{u}'}\tilde{Y}_{n\alpha}(\boldsymbol{u}')\right\} \\
&= -\int_{S_\epsilon^{(2)}} d\boldsymbol{S}' \cdot \left\{\tilde{Y}_{n\alpha}(\boldsymbol{u}')\nabla_{\boldsymbol{u}'}G(\boldsymbol{u}-\boldsymbol{u}') - G(\boldsymbol{u}-\boldsymbol{u}')\nabla_{\boldsymbol{u}'}\tilde{Y}_{n\alpha}(\boldsymbol{u}')\right\}
\end{aligned}
\tag{35}
$$

が成立する。

　とくに、

$$
\begin{aligned}
&\lim_{\epsilon\to+0}\int_{S_\epsilon^{(1)}} d\boldsymbol{S}'\cdot\Big\{\tilde{Y}_{n\alpha}(\boldsymbol{u}')\nabla_{\boldsymbol{u}'}G(\boldsymbol{u}-\boldsymbol{u}') \\
&-G(\boldsymbol{u}-\boldsymbol{u}')\nabla_{\boldsymbol{u}'}\tilde{Y}_{n\alpha}(\boldsymbol{u}')\Big\} \\
&=-\lim_{\epsilon\to+0}\int_{S_\epsilon^{(2)}} d\boldsymbol{S}'\cdot\Big\{\tilde{Y}_{n\alpha}(\boldsymbol{u}')\nabla_{\boldsymbol{u}'}G(\boldsymbol{u}-\boldsymbol{u}') \\
&-G(\boldsymbol{u}-\boldsymbol{u}')\nabla_{\boldsymbol{u}'}\tilde{Y}_{n\alpha}(\boldsymbol{u}')\Big\} \qquad (36)
\end{aligned}
$$

である。

■式 36 左辺

　まず、

$$
S_\epsilon^{'(2)}=\Big\{\boldsymbol{u}'\in\boldsymbol{R}^{D+1}\big||\boldsymbol{u}-\boldsymbol{u}'|=\epsilon\Big\} \qquad (37)
$$

とする。つまり、$S_\epsilon^{'(2)}=\partial V_\epsilon^{(2)}$ である。すると、

$$
\begin{aligned}
&-\lim_{\epsilon\to+0}\int_{S_\epsilon^{(2)}} d\boldsymbol{S}'\cdot\Big\{\tilde{Y}_{n\alpha}(\boldsymbol{u}')\nabla_{\boldsymbol{u}'}G(\boldsymbol{u}-\boldsymbol{u}') \\
&-G(\boldsymbol{u}-\boldsymbol{u}')\nabla_{\boldsymbol{u}'}\tilde{Y}_{n\alpha}(\boldsymbol{u}')\Big\} \\
&=\frac{1}{2}\lim_{\epsilon\to+0}\int_{S_\epsilon^{'(2)}} d\boldsymbol{S}'\cdot\Big\{\tilde{Y}_{n\alpha}(\boldsymbol{u}')\nabla_{\boldsymbol{u}'}G(\boldsymbol{u}-\boldsymbol{u}') \\
&-G(\boldsymbol{u}-\boldsymbol{u}')\nabla_{\boldsymbol{u}'}\tilde{Y}_{n\alpha}(\boldsymbol{u}')\Big\}
\end{aligned}
$$

となる。ただし二つの面積分において、$S_\epsilon^{(2)}$ では $|\boldsymbol{u}-\boldsymbol{u}'|$ が減る方向が正、$S_\epsilon^{'(2)}$ では $|\boldsymbol{u}-\boldsymbol{u}'|$ が増える方向が正となるように定義した。このため符号が異なる。ここでガウスの定理と式 16、24 を用いることにより、

$$
\begin{aligned}
&\frac{1}{2}\lim_{\epsilon\to+0}\int_{S_\epsilon^{'(2)}} d\boldsymbol{S}'\cdot\Big\{\tilde{Y}_{n\alpha}(\boldsymbol{u}')\nabla_{\boldsymbol{u}'}G(\boldsymbol{u}-\boldsymbol{u}') \\
&-G(\boldsymbol{u}-\boldsymbol{u}')\nabla_{\boldsymbol{u}'}\tilde{Y}_{n\alpha}(\boldsymbol{u}')\Big\} \\
&=\frac{1}{2}\lim_{\epsilon\to+0}\int_{V_\epsilon^{(2)}} dV'\Big\{\tilde{Y}_{n\alpha}(\boldsymbol{u}')\Delta_{\boldsymbol{u}'}G(\boldsymbol{u}-\boldsymbol{u}') \\
&-G(\boldsymbol{u}-\boldsymbol{u}')\Delta_{\boldsymbol{u}'}\tilde{Y}_{n\alpha}(\boldsymbol{u}')\Big\} \\
&=\frac{1}{2}\lim_{\epsilon\to+0}\int_{V_\epsilon^{(2)}} dV'\tilde{Y}_{n\alpha}(\boldsymbol{u}')\Delta_{\boldsymbol{u}'}G(\boldsymbol{u}-\boldsymbol{u}') \\
&=-\frac{1}{2}
\end{aligned}
\tag{38}
$$

が導かれる。

■式 36 右辺

まず、

$$
\lim_{\epsilon\to+0}\int_{S_\epsilon^{(1)}} d\boldsymbol{S}'\cdot\Big\{\tilde{Y}_{n\alpha}(\boldsymbol{u}')\nabla_{\boldsymbol{u}'}G(\boldsymbol{u}-\boldsymbol{u}')
$$

$$
-G(\boldsymbol{u}-\boldsymbol{u}')\nabla_{\boldsymbol{u}'}\tilde{Y}_{n\alpha}(\boldsymbol{u}')\Big\}
$$

$$
=\int_{S^D} d\Omega'\Big\{\tilde{Y}_{n\alpha}(1,\Omega'_D)\frac{\partial}{\partial u'}G((1,\Omega_D)-(u',\Omega'_D))\Big|_{u'=1}
$$

$$
-G(\boldsymbol{u}-\boldsymbol{u}')\nabla_{\boldsymbol{u}'}\frac{\partial}{\partial u'}\tilde{Y}_{n\alpha}(u',\Omega'_D)\Big|_{u'=1}\Big\}
$$

$$
=\int_{S^D} d\Omega'\Big\{Y_{n\alpha}(\Omega'_D)\frac{\partial}{\partial u'}G((1,\Omega_D)-(u',\Omega'_D))\Big|_{u'=1}
$$

$$
-G(\boldsymbol{u}-\boldsymbol{u}')\nabla_{\boldsymbol{u}'}\frac{\partial}{\partial u'}\tilde{Y}_{n\alpha}(u',\Omega'_D)\Big|_{u'=1}\Big\}
$$

が示せる。途中で極座標表示 $\boldsymbol{u}=(1,\Omega_D)$, $\boldsymbol{u}'=(1,\Omega'_D)$ を使った。

ここで、

$$
\frac{\partial}{\partial u'}\tilde{Y}_{n\alpha}(u',\Omega'_D)\Big|_{u'=1}=n\tilde{Y}_{n\alpha}(1,\Omega'_D)=nY(\Omega'_D) \quad (39)
$$

や

$$
\begin{aligned}
&\frac{\partial}{\partial u'}G((1,\Omega_D)-(u',\Omega'_D))\bigg|_{u'=1} \\
&=\frac{\partial}{\partial u'}\frac{1}{S_D(D-1)|\boldsymbol{u}-\boldsymbol{u'}|^{D-1}}\bigg|_{u'=1} \\
&=\frac{\partial}{\partial u'}\frac{1}{S_D(D-1)(1+u'-2u'\cos\delta)^{\frac{D-1}{2}}}\bigg|_{u'=1} \\
&=-\frac{D-1}{2}\frac{2u'-2\cos\delta}{S_D(D-1)(1+u'-2u'\cos\delta)^{\frac{D+1}{2}}}\bigg|_{u'=1} \\
&=-\frac{D-1}{2}\frac{1}{S_D(D-1)(2-2\cos\delta)^{\frac{D-1}{2}}} \\
&=-\frac{D-1}{2}\frac{1}{S_D(D-1)|\boldsymbol{u}-\boldsymbol{u}'|^{D-1}} \\
&=-\frac{D-1}{2}G(\boldsymbol{u}-\boldsymbol{u}') \qquad (40)
\end{aligned}
$$

が示せる。ただし最終辺において $\boldsymbol{u}'=(1,\Omega'_D)$ である。（微分の最中に出てきた $\boldsymbol{u}'$ はノルム 1 とは限らないので注意）途中で $\boldsymbol{u}\cdot\boldsymbol{u}'=u'\cos\delta$ を導入した。

以上より、

$$\lim_{\epsilon\to+0}\int_{S_\epsilon^{(1)}} d\boldsymbol{S}'\cdot\left\{\tilde{Y}_{n\alpha}(\boldsymbol{u}')\nabla_{\boldsymbol{u}'}G(\boldsymbol{u}-\boldsymbol{u}')\right.$$
$$\left.-G(\boldsymbol{u}-\boldsymbol{u}')\nabla_{\boldsymbol{u}'}\tilde{Y}_{n\alpha}(\boldsymbol{u}')\right\}$$
$$=-\left(n+\frac{D-1}{2}\right)\int_{S^D} d\Omega'_D\ Y_{n\alpha}(\Omega'_D)G(\boldsymbol{u}-\boldsymbol{u}') \quad (41)$$

となる。

■式 36 まとめ

以上より、

$$Y_{n\alpha}(\Omega_D)=(2n+D-1)\int_{S^D} d\Omega'_D\ Y_{n\alpha}(\Omega'_D)G(\boldsymbol{u}-\boldsymbol{u}') \quad (42)$$

が成立する。

■エネルギースペクトル　式 20 と式 42 を見比べる。

$$\frac{2m_e\kappa}{p_0\hbar}=2n+D-1 \quad (43)$$

と $p_0=\sqrt{-2m_eE}$ より、

$$E=-\frac{1}{2}\frac{1}{\left(\frac{2n+D-1}{2}\right)^2}\frac{m_e}{\hbar^2}\kappa^2 \quad (44)$$

縮重度は

$${}_{n+D}C_n-{}_{n+D-2}C_{n-2} \quad (45)$$

（n は非負整数）

■$D=3$ のときのエネルギースペクトル

　エネルギーは $n \geq 1$ として（前の段落の n とは一つずれているので注意）

$$E_n = -\frac{1}{2}\frac{1}{(n)^2}\frac{m_e}{\hbar^2}\kappa^2 \tag{46}$$

縮重度は

$${}_{(n-1)+3}C_{n-1} - {}_{(n-1)+3-2}C_{(n-1)-2} = n^2 \tag{47}$$

が得られる。

3　付録

3.1　式 11 導出

$\boldsymbol{p}$ に対して、極座標表示 (p,Ω_{D-1}) を導入し、($p = |\boldsymbol{p}|$) $\boldsymbol{u}$ に対しても $\boldsymbol{n}$ が極方向ベクトルとなるように極座標表示 (u,Ω_{D-1},α) を導入する。$(\Omega_{D-1},\alpha) = \Omega_D$、$0 \leq \alpha < \pi$

$$d\boldsymbol{p} = p^{D-1} dp d\Omega_{D-1} \tag{48}$$

$$d\Omega_D = (\sin\alpha)^{D-1} d\alpha d\Omega_{D-1} \tag{49}$$

よって、

$$d\boldsymbol{p} = \left(\frac{p}{\sin\alpha}\right)^{D-1} \frac{dp}{d\alpha} d\Omega_D \tag{50}$$

一方、上記の極座標表示は

$$\cos\alpha = u_n = \frac{p_0^2 - p^2}{p^2 + p_0^2} \tag{51}$$

を意味する。したがって、

$$(\sin\alpha)^2 = \frac{(2p_0)^2 p^2}{(p_0^2 + p^2)^2} \tag{52}$$

となる。両辺 α で微分すると、

$$2\cos\alpha\sin\alpha = \frac{dp}{d\alpha} \frac{2(2p_0)^2 p(p_0^2 - p^2)}{(p_0^2 + p^2)^3} \tag{53}$$

$$\sin\alpha = \frac{(2p_0)p}{p_0^2 + p^2} \tag{54}$$

を用いると、

$$\frac{dp}{d\alpha} = \frac{p_0^2 + p^2}{2p_0} \tag{55}$$

なので、

$$d\boldsymbol{p} = \left(\frac{p}{\sin\alpha}\right)^{D-1} \frac{dp}{d\alpha} d\Omega_D \tag{56}$$

$$= \left(\frac{p_0^2 + p^2}{2p_0}\right)^{D} d\Omega_D \tag{57}$$

3.2　式 12 導出

そのまま $\boldsymbol{u}$、$\boldsymbol{u}'$ を $\boldsymbol{p},\boldsymbol{p}'$ で表した表式を代入することにより、（かなり途中式を省略するが）

$$
\begin{aligned}
&|\boldsymbol{u}-\boldsymbol{u}'|^2 \\
&= \frac{4p_0^2}{(p_0^2+p^2)^2(p_0^2+p'^2)^2} \\
&\times \left\{ p_0^2(p'^2-p^2)^2 + \sum_i \left[p_0^2(p_i-p_i') + (p_i p'^2 - p_i' p^2) \right]^2 \right\} \\
&= \frac{4p_0^2}{(p_0^2+p^2)^2(p_0^2+p'^2)^2} \left\{ p_0^4 + p_0^2(p^2+p'^2) + p^2 p'^2 \right\} |\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}'|^2 \\
&= \frac{4p_0^2}{(p_0^2+p^2)(p_0^2+p'^2)} |\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}'|^2 \qquad (58)
\end{aligned}
$$

となる。（$p=|\boldsymbol{p}|, p'=|\boldsymbol{p}'|$ としている。）

3.3 変数変換 14 をしたときの Ψ の規格化係数について

規格化係数は

$$
\begin{aligned}
&\frac{1}{S_D}\int_{S^D} d\Omega_D \left|\Psi(\Omega_D)\right|^2 \\
&= \int_{S^D} d\Omega_D \frac{1}{p_0}\left(\frac{p^2+p_0^2}{2p_0}\right)^{D+1} |\tilde{\psi}(\boldsymbol{p})|^2 \\
&= \int_{\boldsymbol{R}^D} d\boldsymbol{p}\ \frac{p^2+p_0^2}{2p_0^2}|\tilde{\psi}(\boldsymbol{p})|^2
\end{aligned}
$$

が成立しているが、逆フーリエ変換により、

$$
\begin{aligned}
&\int_{\boldsymbol{R}^D} d\boldsymbol{p}\ \boldsymbol{p}^2\ |\tilde{\psi}(\boldsymbol{p})|^2 \\
&= \int_{\boldsymbol{R}^D} d\boldsymbol{x} \int_{\boldsymbol{R}^D} d\boldsymbol{x}' \left(-\hbar^2\nabla_x^2\right)\psi^*(\boldsymbol{x}')\psi(\boldsymbol{x})\delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}') \\
&= \int_{\boldsymbol{R}^D} d\boldsymbol{x}\ \psi^*(\boldsymbol{x})\left(-\hbar^2\nabla_x^2\right)\psi(\boldsymbol{x}) \\
&= \langle\hat{p}\rangle = 2m\langle K\rangle
\end{aligned}
\tag{59}
$$

（今回定義したフーリエ変換は規格化条件 $\int_{\boldsymbol{R}^D} d\boldsymbol{p}\ |\tilde{\psi}(\boldsymbol{p})|^2 = 1$ を保つのでこの結果は当たり前とも言えるが、）となる。ただし、$\langle K\rangle$ は運動エネルギーの期待値である。ビリアル定理に

より、r^{-1} のポテンシャル下の運動では、

$$\langle K\rangle = -\frac{\langle V\rangle}{2} \tag{60}$$

が成立する。（$\langle V\rangle$ はポテンシャルエネルギーの期待値）これと、$E = \langle K\rangle + \langle V\rangle$ を合わせると、

$$E = -\langle K\rangle \tag{61}$$

となり、

$$\int_{\boldsymbol{R}^D} d\boldsymbol{p}\ \boldsymbol{p}^2\ |\tilde{\psi}(\boldsymbol{p})|^2 = -2m_e E = p_0^2 \tag{62}$$

となるので、

$$\frac{1}{S_D}\int_{S^D} d\Omega_D \left|\Psi(\Omega_D)\right|^2 = 1 \tag{63}$$

となる。