

クーロンポテンシャルと等方調和振動子ポテンシャル（その1）

adhara*

2021年5月2日

目次

1	問題設定	2
2	球座標変数分離を用いた解法	3
2.1	球座標変数分離	3
2.2	ラグール関数を用いた動径波動関数の表記 . .	6
3	考察	12

* [Twitter @adhara_mathphys](#)

1 問題設定

本ノートでは一般次元 ($D \geq 2$) を考える。クーロンポテンシャルとは各次元について r^{-1} の依存性をもつ負のポテンシャルを指す。3次元の時以外は必ずしも電磁気学におけるガウスの法則とは整合しないものなので、注意を与えておく。

クーロンポテンシャルのシュレディンガー方程式 ($\kappa > 0$) では

$$H\Psi(\mathbf{r}) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta_{\mathbb{R}^D} - \frac{\kappa}{r} \right] \Psi(\mathbf{r}) = E\Psi(\mathbf{r}) \quad (1)$$

の束縛状態の解 ($E < 0$) を求めることを考え、等方調和振動子に対するシュレディンガー方程式 ($k > 0$) では

$$H\Psi(\mathbf{r}) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta_{\mathbb{R}^D} + \frac{1}{2}kr^2 \right] \Psi(\mathbf{r}) = E\Psi(\mathbf{r}) \quad (2)$$

の解を考える。両シュレディンガー方程式では D 次元のラプラシアン

$$\Delta_{\mathbb{R}^D} = \sum_{i=1}^D \frac{\partial^2}{\partial x_i^2}$$

を導入している。

2 球座標変数分離を用いた解法

2.1 球座標変数分離

2.1.1 ラプラシアンの変数分離と超球面調和関数

方程式 1,2 は球対称性を持つために球座標を用いた変数分離が可能である。

まず、 D 次元のラプラシアン $\Delta_{\mathbb{R}^D}$ の変数分離を行うと

$$\Delta_{\mathbb{R}^D} = \frac{1}{r^{D-1}} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^D \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\Delta_{S^{D-1}}}{r^2} \quad (3)$$

のように表せる。ここで角運動量演算子との間には

$$\Delta_{S^{D-1}} = -\frac{L^2}{\hbar^2} \quad (4)$$

の関係が成立する。この $\Delta_{S^{D-1}}$ は角運動量演算子になすリー代数 $\mathfrak{so}(D)$ においてカシミール不変量としての働きを持つ、すなわち全ての角運動量演算子と可換である。

ここで角度部分は D 次元空間中の超球面 S^{D-1} 上のラプラス・ベルトラミ演算子の固有関数であり、超球面調和関数である。すなわち、

$$\Delta_{S^{D-1}} Y_{lm} = -l(l + D - 2) Y_{lm} \quad (5)$$

が成立している。第一の指標 $l \geq 0$ は $\mathfrak{so}(D)$ におけるユニタリ既約表現の最高ウェイトを表すものであり、もう一つの指標 m は l で指定されるユニタリ既約表現中の正規直交基底を区別するためのものである。物理的な用語としては l は角運動量量子数である。この既約表現 V_l の次元は元の空間の次元 D も用いて、

$$\dim V_l^{(D)} = l_{+D-1} C_l - l_{+D-3} C_{l-2} \quad (6)$$

となる。

以下では、

$$\Psi(\mathbf{r}) = R_l(r) Y_{lm}(\Omega) \quad (7)$$

のように動径部分と角度部分に変数分離した固有波動関数を考える。

2.1.2 クーロンポテンシャルにおける動径部分の波動方程式

次の定数や変数を導入すると、

$$\alpha^2 = -\frac{2m_e E}{\hbar^2}, \beta^2 = -\frac{\kappa^2 m_e}{2E \hbar^2}, r = t/\alpha \quad (8)$$

動径部分の波動方程式は

$$\frac{1}{2} \left[-t \frac{d^2}{dt^2} - (D-1) \frac{d}{dt} + \frac{l(l+D-2)}{t} + t \right] R_l(t/\alpha) = \beta R_l(t/\alpha) \quad (9)$$

となる。さらに変形すると、

$$\frac{1}{2} \left[-t \frac{d^2}{dt^2} + \frac{(2l + D - 2)^2 - 1}{4t} + t \right] \varphi_l(t) = \beta \varphi_l(t) \quad (10)$$

となる。ただし、

$$\varphi_l(t) = t^{\frac{D-1}{2}} R_l(t/\alpha) \quad (11)$$

とした。

2.1.3 調和振動子ポテンシャルにおける動径部分の波動方程式

次の定数や変数を導入すると、

$$\alpha^2 = \frac{k m_e}{4 \hbar^2}, \beta^2 = \frac{E^2 m_e}{4k \hbar^2}, r = \sqrt{t/\alpha} \quad (12)$$

動径部分の波動方程式は

$$\frac{1}{2} \left[-t \frac{d^2}{dt^2} - \frac{D}{2} \frac{d}{dt} + \frac{l(l + D - 2)}{4t} + t \right] R_l(\sqrt{t/\alpha}) = \beta R_l(\sqrt{t/\alpha}) \quad (13)$$

となる。さらに変形すると、

$$\frac{1}{2} \left[-t \frac{d^2}{dt^2} + \frac{(l + D/2 - 1)^2 - 1}{4t} + t \right] \varphi_l(t) = \beta \varphi_l(t) \quad (14)$$

となる。ただし、

$$\varphi_l(t) = t^{\frac{D}{4}} R_l(\sqrt{t/\alpha}) \quad (15)$$

とした。

2.2 ラゲール関数を用いた動径波動関数の表記

2.2.1 ラゲール関数

ラゲール・ソニン多項式（ラゲール陪多項式）は、Kummerの第1種合流型超幾何級数 $M(a; b; c)$ を用いて

$$L_n^\mu(x) = \frac{(\mu+1)_n}{n!} M(-n; \mu+1; x) \quad (16)$$

と書くことができる。^{*1} $n \geq 0, k \geq 0$ が整数の時、

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x} x^k L_n^k(x) L_m^k(x) = \frac{(n+k)!}{n!} \delta_{n,m} \quad (17)$$

のような直交関係が成立する。^{*2} ラゲール・ソニン多項式は以下の二階常微分方程式を満たす。

$$x \frac{d^2 L_n^\mu}{dx^2} + (\mu+1-x) \frac{dL_n^\mu}{dx} + n L_n^\mu(x) = 0 \quad (18)$$

^{*1} 非負整数 n を実数 ν に拡張する場合は $L_\nu^\mu(x) = \frac{\Gamma(\mu+\nu+1)}{\Gamma(\nu+1)\Gamma(\mu+1)} M(-n; \mu+1; x)$

^{*2} G. B. Arfken, H. J. Weber: "Mathematical Methods For Physicists", 6th edition (2005), ELSEVIER.

ラゲール関数をラゲール・ソニン多項式を用いて

$$\Phi_n^\mu(t) = e^{-t} t^{(\mu+1)/2} L_n^\mu(2t) \quad (19)$$

と定義する。この時、

$$\frac{1}{2} \left[-t \frac{d^2}{dt^2} + \frac{\mu^2 - 1}{4t} + t \right] \Phi_n^\mu(t) = \frac{2n + \mu + 1}{2} \Phi_n^\mu(t) \quad (20)$$

が成立する。

2.2.2 クーロンポテンシャルにおける動径部分波動関数 解くべき微分方程式

$$\frac{1}{2} \left[-t \frac{d^2}{dt^2} + \frac{(2l + D - 2)^2 - 1}{4t} + t \right] \varphi_l(t) = \beta \varphi_l(t)$$

のうち境界条件 ($\lim_{t \rightarrow \infty} |R_l(t)| < \infty$) を満たす解は、 $n \in \mathbb{Z}_{\geq 0}$ として、

$$\beta = n + \frac{2l + D - 1}{2}, \varphi_l(t) = \Phi_n^{2l+D-2}(t) \quad (21)$$

動径部分の波動関数は量子数 n を加えて表される必要があり、

$$R_{nl}(t/\alpha) = e^{-t} t^l L_n^{2l+D-2}(2t) \quad (22)$$

となる。

二つの量子数 n, l に依存する β が同じ解は同じエネルギーを与えるので、これを主量子数と呼ぶのが適当である。対応するエネルギーは

$$E = -\frac{1}{2\left(n+l+\frac{D-1}{2}\right)^2} \kappa^2 \frac{m_e}{\hbar^2} = -\frac{1}{2\beta^2} \kappa^2 \frac{m_e}{\hbar^2} \quad (23)$$

となる。

また、 $\beta = m + \frac{D-1}{2}$ となるようなエネルギー状態の縮重度は

$$\sum_{l=0}^m \dim V_l^{(D)} = \sum_{l=0}^m ({}_{l+D-1}C_l - {}_{l+D-2}C_{l-2}) \quad (24)$$

$$= {}_{m+D-1}C_m + m + D - 2C_{m-1} \quad (25)$$

$$= \frac{(m+D-2)!(D+2m-1)}{m!(D-1)!} \quad (26)$$

である。

図 1 はクーロンポテンシャルにおけるエネルギー状態図である。すなわち、許される主量子数 β と角運動量量子数 l の領域を表している。各線は $\dim V_l^{(D)}$ 個の状態の集まり、すなわちエネルギー H とラプラス・ベルトラミ演算子 Δ_{S^D} の同時固有状態からなる部分ヒルベルト空間を表す。同じ主量子数は同じエネルギーを表すのでエネルギーの観点での縮重度を知るためには同じレベルにある各線の次元を全てたす必要がある。

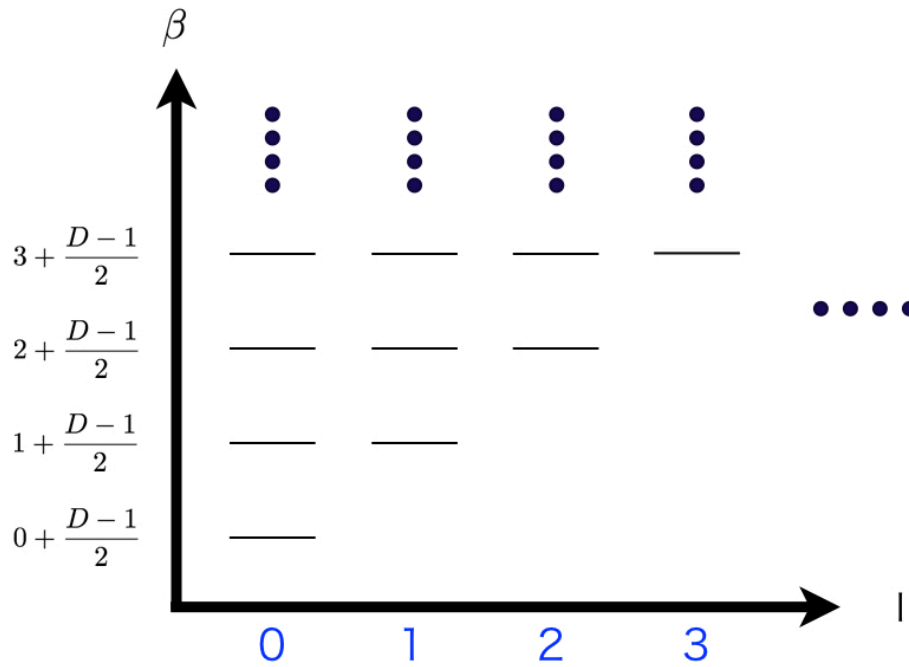


図1 クーロンポテンシャルにおけるエネルギー状態

2.2.3 調和振動子ポテンシャルにおける動径部分波動関数

解くべき微分方程式

$$\frac{1}{2} \left[-t \frac{d^2}{dt^2} + \frac{(l + D/2 - 1)^2 - 1}{4t} + t \right] \varphi_l(t) = \beta \varphi_l(t)$$

のうち境界条件 ($\lim_{t \rightarrow \infty} R_l(t) < \infty$) を満たす解は、 $n \in \mathbb{Z}_{\geq 0}$ として、

$$\beta = n + \frac{l + D/2}{2}, \varphi_l(t) = \Phi_n^{l+D/2-1}(t) \quad (27)$$

動径部分の波動関数には量子数 n も加えて表す必要があり、

$$R_l(\sqrt{t/\alpha}) = e^{-t} t^{\frac{l}{2}} L_n^{l+D/2-1}(2t) \quad (28)$$

となる。

二つの量子数 n, l に依存する β が同じ解は同じエネルギーを与えるので、これを主量子数と呼ぶのが適当である。こちらの主量子数は整数あるいは半整数である。対応するエネルギーは

$$E = \left(2n + l + \frac{D}{2} \right) \hbar \sqrt{\frac{k}{m_e}} \quad (29)$$

となる。

パリティ正 $\beta = m + \frac{D}{4}, m \in \mathbb{Z}_{\geq 0}$ となる場合の縮重度は

$$\sum_{k=0}^m \dim V_{2k}^{(D)} = {}_{2m+D-1}C_{D-1} \quad (30)$$

となり、パリティ負 $\beta = m + \frac{1}{2} + \frac{D}{4}, m \in \mathbb{Z}_{\geq 0}$ となる場合の縮重度は

$$\sum_{k=0}^m \dim V_{2k+1}^{(D)} = {}_{2m+D}C_{D-1} \quad (31)$$

となる。

図 2 はクーロンポテンシャルにおけるエネルギー状態図である。すなわち、許される主量子数 β と角運動量量子数 l の

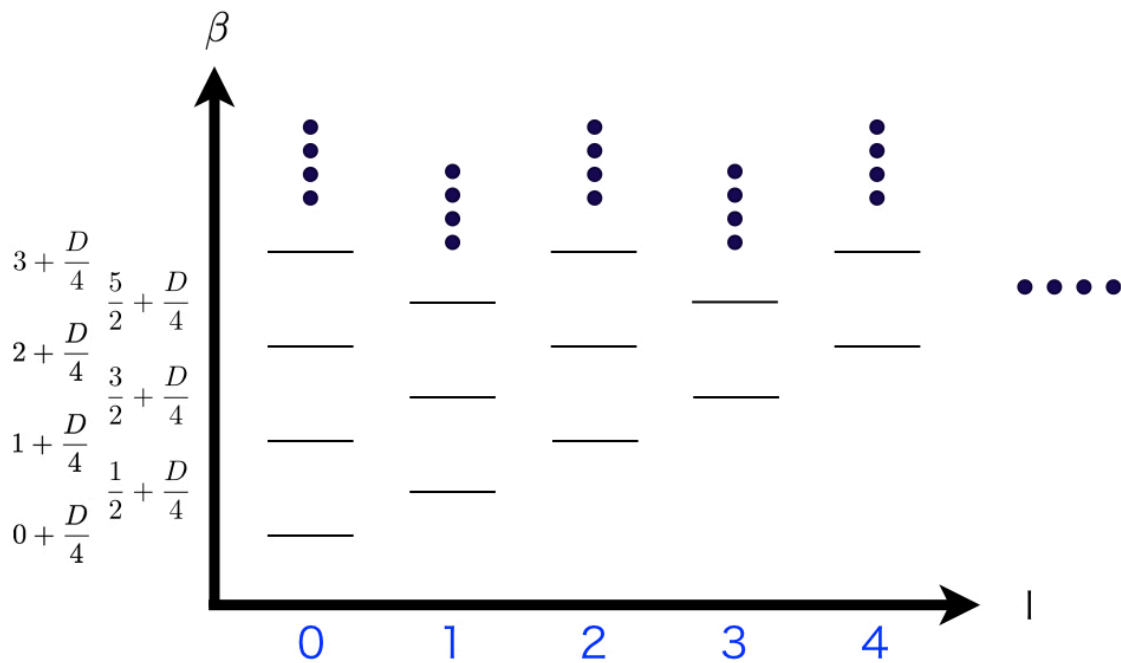


図 2 等方調和振動子ポテンシャルにおけるエネルギー状態

領域を表している。各線は $\dim V_l^{(D)}$ 個の状態の集まり、すなわちエネルギー H とラプラス・ベルトラミ演算子 Δ_{S^D} の同時固有状態からなる部分ヒルベルト空間を表す。同じ主量子数は同じエネルギーを表すのでエネルギーの観点での縮重度を知るためには同じレベルにある各線の次元を全てたす必要がある。

3 考察

クーロンポテンシャルの場合の動径部分波動方程式の変形

$$\frac{1}{2} \left[-t \frac{d^2}{dt^2} + \frac{(2l + D - 2)^2 - 1}{4t} + t \right] \varphi_l(t) = \beta \varphi_l(t)$$

と等方調和振動子の場合の動径部分波動方程式の変形

$$\frac{1}{2} \left[-t \frac{d^2}{dt^2} + \frac{(l' + D'/2 - 1)^2 - 1}{4t} + t \right] \varphi_{l'}(t) = \beta \varphi_{l'}(t)$$

を比較する。すると、

$$\begin{aligned} D' &= 2(D - 1) \\ l' &= 2l \end{aligned} \quad (32)$$

としたときに両者は同じ方程式になることがわかる。

すなわち、 D 次元クーロンポテンシャルの問題において l の角運動量量子数を持つ解の動径成分は、 $2(D - 1)$ 次元等方調和振動子ポテンシャルの問題において $2l$ の角運動量量子数を持つ解の動径成分と同じ関数形を利用できることを表す。

特に角運動量に着目するとクーロンポテンシャルの動径部分の波動関数は、等方調和振動子ポテンシャルの中でも偶数の角運動量量子数を持つものに対応することがわかる。角運動量量子数の偶奇はすなわちパリティの偶奇（空間反転に対

する偶奇)と同じである。このことは図 2 の中で l が偶数となる状態を全て取り除いたものが、図 1 の全状態と似ていることを表す。ただし、例外 ($D = 2$) を除いてクーロンポテンシャルに対応する等方調和振動子ポテンシャルの次元は異なるので、対応する線の縮重度が異なることは留意する必要がある。例外である $D = 2$ のときは、対応する調和振動子ポテンシャルの次元も 2 であり、各線の縮重度も含めて対応関係が成立する。

また等方調和振動子ポテンシャルの対応物は必ず偶数次元となる。

さらに図 1 と図 2 の比較でわかることは、両ポテンシャルにおけるパリティ演算子の役割の違いである。クーロンポテンシャルにおいては縮退する状態はパリティを保存しない。したがって、エネルギー固有状態としてはパリティを混ぜる解が存在する。すなわちパリティ演算子と対称性代数 ($\mathfrak{so}(D + 1)$ を構成する) は可換ではない。ただし、対称性代数のうちその部分代数である幾何学的な球対称成分 $\mathfrak{so}(D)$ (角運動量代数によって構成される) についてはパリティ演算子と可換である。外積代数の言葉としては角運動量は二形式だからである。全対称性代数 $\mathfrak{so}(D + 1)$ と球対称代数 $\mathfrak{so}(D)$ の差分はラプラス・ルンゲ・レンツベクトルと呼ばれるものである。ベクトルなのでパリティ演算子と非可換である。一方で、等方調和

振動子においては縮退する状態はパリティを保存する。すなわち各エネルギー固有状態のパリティは定まる。これはパリティ演算子と対称性代数 ($\mathfrak{su}(D)$ を構成する) が可換であることを示している。

特にクーロンポテンシャルの問題が $D = 2, 3, 5, 9$ の時、対応する等方調和振動子ポテンシャルの問題は $D = 2, 4, 8, 16$ である。この時は Hopf fibration を利用した一般化 Kustaanheimo-Stiefel 変換 (あるいは Hurwitz 変換)^{*3} と呼ばれる対応関係が生じる。これら特別の次元の存在については、

- アダムスの定理 (Hopf fibration が上のものに限られる)
- 実数体上のノルム多元体の存在に関する Hurwitz の定理
- 超球面における平行化可能性の問題
- クリフォード代数などにおけるボット周期性

などの代数的位相幾何学に関する話題と関連があって奥深いものである。今回の一般次元における両ポテンシャルの関係性と特別な次元における Hurwitz 変換の存在の違いについては追求されるべきであると考えられる。

^{*3} M. HAGE HASSAN and M. KIBLER: "On Hurwitz Transformations", arXiv:hep-th/9409051v1.