Kustaanheimo-Stiefel 変換

（その２）Schrödinger 方程式の書き換え

adhara*

2018 年 5 月 20 日

概要

本ノートでは非相対論的水素原子の Schrödinger 方程式を Kustaanheimo-Stiefel 変換によって四次元空間中の調和振動子の量子力学的問題に書き換える、ということを行う。本ノートを書くにあたり Cornish, F. H. J. (1984) [*1] を参考にしている。

* Twitter @adhara_mathphys

*1 Cornish, F. H. J. (1984). The hydrogen atom and the four-dimensional harmonic oscillator. Journal of Physics A: Mathematical and General, 17(2), 323.

目次

1　問題設定

非相対論的水素様原子に対する Schrödinger 方程式、

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

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。

簡単のために幾分の規格化を行っておく。すなわち、

$$\begin{cases} \frac{8mE}{\hbar^2} = -\alpha^4 \\ \lambda = \frac{8m}{\hbar^2}\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \end{cases}$$

とおくと、

$$\left(4\nabla^2 + \frac{\lambda}{r} - \alpha^4\right)\Psi(\boldsymbol{r}) = 0 \tag{2}$$

と書き換えられる。

以下、式 2 の固有方程式を考えるものとする。

2　Kustaanheimo-Stiefel 変換の準備

まず、$\boldsymbol{r} = (x, y, z)$ として、

$$x + \mathrm{i}y = 2\xi_a\bar{\xi}_b,\ z = \xi_a\bar{\xi}_a - \xi_b\bar{\xi}_b \tag{3}$$

を満たす、複素数の組 $(\xi_a, \xi_b) \in \mathbb{C}^2$ を求めることを考える。ただし $\bar{}$ は複素共役をとる操作を意味する。このような変換があるとすると明らかにこの変換は単射であるが全射ではない。

この変換式 3 を具体的に定めるために極座標表示を考える。すなわち、$(x, y, z) = (r\sin\theta\cos\phi, r\sin\theta\sin\phi, r\cos\theta)$ とする。（$r \geq 0, 0 \leq \theta \leq \pi, 0 \leq \phi < 2\pi$）この時、上記の変換式 3 を満たすためには

$$x + \mathrm{i}y = re^{\mathrm{i}\phi}\sin\theta \tag{4}$$

$$z = r\cos\theta = |\xi_a|^2 - |\xi_b|^2 \tag{5}$$

となる必要がある。これらを $|\xi_a|^2 + |\xi_b|^2 = r$ と合わせると、

$$|\xi_a|^2 = r\cos^2\frac{\theta}{2} \tag{6}$$

$$|\xi_b|^2 = r\sin^2\frac{\theta}{2} \tag{7}$$

が成立する必要があることがわかる。以上より式 3 が成立するためには $0 \leq \sigma < 4\pi$ として

$$\xi_a = \sqrt{r}\cos\left(\frac{\theta}{2}\right)e^{\mathrm{i}(\sigma+\phi)/2} \tag{8}$$

$$\xi_b = \sqrt{r}\sin\left(\frac{\theta}{2}\right)e^{\mathrm{i}(\sigma-\phi)/2} \tag{9}$$

の形となる必要があることがわかる。（十分条件にもなっていることは容易にわかる。）すなわち、変換式 3 は実は因子 σ

の分の任意性があったのだということがわかる。変換式 9 は (σ, x, y, z) と ξ_a, ξ_b の間でのほぼ[*2]一対一対応の変換を表す。

この変換 9 による (ξ_a, ξ_b) を用いると

$$\begin{aligned} r &= |\xi_a|^2 + |\xi_b|^2 = \xi_a\bar{\xi}_a + \xi_b\bar{\xi}_b && (10) \\ x^2 + y^2 &= 4|\xi_a|^2|\xi_b|^2 = 4\xi_a\bar{\xi}_a\xi_b\bar{\xi}_b && (11) \\ \frac{\xi_b\bar{\xi}_b}{\xi_a\bar{\xi}_a} &= \tan^2\left(\frac{\theta}{2}\right) && (12) \\ e^{2i\sigma} &= \frac{\xi_a\xi_b}{\bar{\xi}_a\bar{\xi}_b} && (13) \\ e^{2i\phi} &= \frac{\xi_a\bar{\xi}_b}{\bar{\xi}_a\xi_b} && (14) \end{aligned}$$

等が成立する。

3 Schrödinger 方程式に対する Kustaanheimo-Stiefel 変換の適用

ここからは変換式 9 を用いて Schrödinger 方程式 2 を $\xi_a, \xi_b, \bar{\xi}_a, \bar{\xi}_b$ に関する偏微分方程式として書き換えることを行う。本質的な作業は三次元空間のラプラシアン $\nabla^2_{\mathbb{R}^3} = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$ を書き換えるものである。微分における連鎖律を使えば可能である。

[*2] 極点を除けば

便利な変換式 14 等を用いると

$$
\begin{cases}
\frac{\partial r}{\partial \xi_a} = \bar{\xi}_a, \frac{\partial \theta}{\partial \xi_a} = -\frac{1}{r}\sqrt{\frac{\bar{\xi}_a \xi_b \bar{\xi}_b}{\xi_a}}, \frac{\partial \phi}{\partial \xi_a} = \frac{1}{2\mathrm{i}\xi_a}, \frac{\partial \sigma}{\partial \xi_a} = \frac{1}{2\mathrm{i}\xi_a} \\
\frac{\partial r}{\partial \bar{\xi}_a} = \xi_a, \frac{\partial \theta}{\partial \bar{\xi}_a} = -\frac{1}{r}\sqrt{\frac{\xi_a \xi_b \bar{\xi}_b}{\bar{\xi}_a}}, \frac{\partial \phi}{\partial \bar{\xi}_a} = \frac{1}{2\mathrm{i}\bar{\xi}_a}, \frac{\partial \sigma}{\partial \bar{\xi}_a} = -\frac{1}{2\mathrm{i}\bar{\xi}_a} \\
\frac{\partial r}{\partial \xi_b} = \bar{\xi}_b, \frac{\partial \theta}{\partial \xi_b} = \frac{1}{r}\sqrt{\frac{\bar{\xi}_b \xi_a \bar{\xi}_a}{\xi_b}}, \frac{\partial \phi}{\partial \xi_b} = -\frac{1}{2\mathrm{i}\xi_b}, \frac{\partial \sigma}{\partial \xi_b} = \frac{1}{2\mathrm{i}\xi_b} \\
\frac{\partial r}{\partial \bar{\xi}_b} = \xi_b, \frac{\partial \theta}{\partial \bar{\xi}_b} = -\frac{1}{r}\sqrt{\frac{\xi_b \xi_a \bar{\xi}_a}{\bar{\xi}_b}}, \frac{\partial \phi}{\partial \bar{\xi}_b} = \frac{1}{2\mathrm{i}\bar{\xi}_b}, \frac{\partial \sigma}{\partial \bar{\xi}_b} = -\frac{1}{2\mathrm{i}\bar{\xi}_b}
\end{cases}
$$

がわかる。これと連鎖律

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial \xi_a} &= \frac{\partial r}{\partial \xi_a}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial \theta}{\partial \xi_a}\frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\partial \phi}{\partial \xi_a}\frac{\partial}{\partial \phi} + \frac{\partial \sigma}{\partial \xi_a}\frac{\partial}{\partial \sigma} \\
\frac{\partial}{\partial \xi_b} &= \frac{\partial r}{\partial \xi_b}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial \theta}{\partial \xi_b}\frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\partial \phi}{\partial \xi_b}\frac{\partial}{\partial \phi} + \frac{\partial \sigma}{\partial \xi_b}\frac{\partial}{\partial \sigma}
\end{aligned} \tag{15}
$$

を用いると

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial \xi_a}\frac{\partial}{\partial \bar{\xi}_a} = \frac{\partial}{\partial r} - \left(\frac{1}{2}\sqrt{\frac{\xi_b \bar{\xi}_b}{\xi_a \bar{\xi}_a}}\frac{1}{r} - \sqrt{\xi_a \bar{\xi}_a \xi_b \bar{\xi}_b}\frac{1}{r^2}\right)\frac{\partial}{\partial \theta} \\
+ \xi_a \frac{\partial}{\partial \xi_a}\frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{r}\sqrt{\frac{\xi_a \xi_b \bar{\xi}_b}{\bar{\xi}_a}}\frac{\partial}{\partial \xi_a}\frac{\partial}{\partial \theta} \\
- \frac{1}{2\mathrm{i}\bar{\xi}_a}\frac{\partial}{\partial \xi_a}\frac{\partial}{\partial \phi} - \frac{1}{2\mathrm{i}\bar{\xi}_a}\frac{\partial}{\partial \xi_a}\frac{\partial}{\partial \sigma}
\end{aligned} \tag{16}
$$

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial \xi_b}\frac{\partial}{\partial \bar{\xi}_b} = \frac{\partial}{\partial r} &+ \left(\frac{1}{2}\sqrt{\frac{\xi_a\bar{\xi}_a}{\xi_b\bar{\xi}_b}}\frac{1}{r} - \sqrt{\xi_a\bar{\xi}_a\xi_b\bar{\xi}_b}\frac{1}{r^2}\right)\frac{\partial}{\partial \theta} \\
&+ \xi_b\frac{\partial}{\partial \xi_b}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}\sqrt{\frac{\xi_b\xi_a\bar{\xi}_a}{\bar{\xi}_b}}\frac{\partial}{\partial \xi_b}\frac{\partial}{\partial \theta} \\
&+ \frac{1}{2\mathrm{i}\bar{\xi}_b}\frac{\partial}{\partial \xi_b}\frac{\partial}{\partial \phi} - \frac{1}{2\mathrm{i}\bar{\xi}_b}\frac{\partial}{\partial \xi_b}\frac{\partial}{\partial \sigma}
\end{aligned} \tag{17}
$$

となる。したがって、

$$
\begin{aligned}
&\frac{\partial}{\partial \xi_a}\frac{\partial}{\partial \bar{\xi}_a} + \frac{\partial}{\partial \xi_b}\frac{\partial}{\partial \bar{\xi}_b} \\
&= 2\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{2r}\left(\sqrt{\frac{\xi_a\bar{\xi}_a}{\xi_b\bar{\xi}_b}} - \sqrt{\frac{\xi_b\bar{\xi}_b}{\xi_a\bar{\xi}_a}}\right)\frac{\partial}{\partial \theta} \\
&+ \left(\xi_a\frac{\partial}{\partial \xi_a} + \xi_b\frac{\partial}{\partial \xi_b}\right)\frac{\partial}{\partial r} \\
&+ \frac{1}{r}\left(\sqrt{\frac{\xi_b\xi_a\bar{\xi}_a}{\bar{\xi}_b}}\frac{\partial}{\partial \xi_b} - \sqrt{\frac{\xi_a\xi_b\bar{\xi}_b}{\bar{\xi}_a}}\frac{\partial}{\partial \xi_a}\right)\frac{\partial}{\partial \theta} \\
&+ \frac{1}{2\mathrm{i}}\left(\frac{1}{\bar{\xi}_b}\frac{\partial}{\partial \xi_b} - \frac{1}{\bar{\xi}_a}\frac{\partial}{\partial \xi_a}\right)\frac{\partial}{\partial \phi} \\
&- \frac{1}{2\mathrm{i}}\left(\frac{1}{\bar{\xi}_b}\frac{\partial}{\partial \xi_b} + \frac{1}{\bar{\xi}_a}\frac{\partial}{\partial \xi_a}\right)\frac{\partial}{\partial \sigma}
\end{aligned} \tag{18}
$$

となる。

式 18 をさらに変形していく。まず、

$$\sqrt{\frac{\xi_a\bar{\xi}_a}{\xi_b\bar{\xi}_b}}-\sqrt{\frac{\xi_b\bar{\xi}_b}{\xi_a\bar{\xi}_a}}=\frac{\cos\frac{\theta}{2}}{\sin\frac{\theta}{2}}-\frac{\sin\frac{\theta}{2}}{\cos\frac{\theta}{2}}=2\frac{\cos\theta}{\sin\theta} \tag{19}$$

がわかるので式 18 の第 2 項については処理ができる。式 18 の 3 ～ 6 項の変形を行う。式 18 の 3 ～ 6 項に連鎖律 15 を残っている $\partial_{\xi_a},\partial_{\xi_b}$ に代入して整理すると、

$$\begin{aligned}
&r\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}+\frac{1}{4}\left(\frac{1}{\xi_b\bar{\xi}_b}+\frac{1}{\xi_a\bar{\xi}_a}\right)\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\\
&+2\left(\frac{1}{2\mathrm{i}}\right)^2\left(\frac{1}{\xi_b\bar{\xi}_b}-\frac{1}{\xi_a\bar{\xi}_a}\right)\frac{\partial}{\partial\phi}\frac{\partial}{\partial\sigma}\\
&-\left(\frac{1}{2\mathrm{i}}\right)^2\left(\frac{1}{\xi_b\bar{\xi}_b}+\frac{1}{\xi_a\bar{\xi}_a}\right)\frac{\partial^2}{\partial\sigma^2} && (20)\\
&=r\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}+\frac{1}{r}\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2} && (21)\\
&-2\frac{1}{r}\frac{\cos\theta}{\sin^2\theta}\frac{\partial}{\partial\sigma}\frac{\partial}{\partial\phi}+\frac{1}{r}\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\sigma^2} && (22)
\end{aligned}$$

が導かれる。ここで

$$\frac{1}{\xi_b\bar{\xi}_b}+\frac{1}{\xi_a\bar{\xi}_a}=\frac{1}{r}\left(\frac{1}{\cos^2\frac{\theta}{2}}+\frac{1}{\sin^2\frac{\theta}{2}}\right)=\frac{4}{r}\frac{1}{\sin^2\theta} \tag{23}$$

$$\frac{1}{\xi_b\bar{\xi}_b}-\frac{1}{\xi_a\bar{\xi}_a}=\frac{1}{r}\left(\frac{1}{\sin^2\frac{\theta}{2}}-\frac{1}{\cos^2\frac{\theta}{2}}\right)=\frac{4}{r}\frac{\cos\theta}{\sin^2\theta} \tag{24}$$

を用いた。以上より、

$$
\begin{aligned}
&\frac{\partial}{\partial \xi_a}\frac{\partial}{\partial \bar{\xi}_a}+\frac{\partial}{\partial \xi_b}\frac{\partial}{\partial \bar{\xi}_b} \\
&=2\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r}\frac{\cos\theta}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial \theta} \\
&+r\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial \theta^2}+\frac{1}{r}\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \\
&-2\frac{1}{r}\frac{\cos\theta}{\sin^2\theta}\frac{\partial}{\partial \sigma}\frac{\partial}{\partial \phi}+\frac{1}{r}\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial \sigma^2}
\end{aligned}
\tag{25}
$$

となる。ここで三次元ラプラシアンの極座標表示

$$
\nabla^2_{\mathbb{R}^3}=\frac{1}{r^2\sin\theta}\left[\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\sin\theta\frac{\partial}{\partial r}\right)+\frac{\partial}{\partial \theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial \theta}\right)+\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial^2}{\partial \phi^2}\right]
\tag{26}
$$

と見比べると、

$$
\frac{\partial}{\partial \xi_a}\frac{\partial}{\partial \bar{\xi}_a}+\frac{\partial}{\partial \xi_b}\frac{\partial}{\partial \bar{\xi}_b}=r\nabla^2_{\mathbb{R}^3}-2\frac{1}{r}\frac{\cos\theta}{\sin^2\theta}\frac{\partial}{\partial \sigma}\frac{\partial}{\partial \phi}+\frac{1}{r}\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial \sigma^2}
\tag{27}
$$

となることがわかる。

　ここで作用の対象である波動関数は σ を変数として含まない。したがって、

$$
\frac{\partial}{\partial \xi_a}\frac{\partial}{\partial \bar{\xi}_a}+\frac{\partial}{\partial \xi_b}\frac{\partial}{\partial \bar{\xi}_b}=r\nabla^2_{\mathbb{R}^3}
\tag{28}
$$

として構わない。

以上より Schrödinger 方程式 2 は

$$\left(\frac{\partial}{\partial \xi_a}\frac{\partial}{\partial \bar{\xi}_a}+\frac{\partial}{\partial \xi_b}\frac{\partial}{\partial \bar{\xi}_b}+\lambda-\alpha^4(\xi_a\bar{\xi}_a+\xi_b\bar{\xi}_b)\right)\Psi(\xi_a,\bar{\xi}_a,\xi_b,\bar{\xi}_b)=0 \tag{29}$$

と変形できる。また σ を変数として含まないことから、

$$\frac{\partial}{\partial \sigma}\Psi(\xi_a,\bar{\xi}_a,\xi_b,\bar{\xi}_b)=0 \tag{30}$$

という式も成立する必要がある。

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial \sigma}&=\frac{\partial \xi_a}{\partial \sigma}\frac{\partial}{\partial \xi_a}+\frac{\partial \bar{\xi}_a}{\partial \sigma}\frac{\partial}{\partial \bar{\xi}_a}+\frac{\partial \xi_b}{\partial \sigma}\frac{\partial}{\partial \xi_b}+\frac{\partial \bar{\xi}_b}{\partial \sigma}\frac{\partial}{\partial \bar{\xi}_b}\\&=\frac{\mathrm{i}}{2}\left(\xi_a\frac{\partial}{\partial \xi_a}-\bar{\xi}_a\frac{\partial}{\partial \bar{\xi}_a}+\xi_b\frac{\partial}{\partial \xi_b}-\bar{\xi}_b\frac{\partial}{\partial \bar{\xi}_b}\right)\end{aligned} \tag{31}$$

より、式 30 は

$$\left(\xi_a\frac{\partial}{\partial \xi_a}-\bar{\xi}_a\frac{\partial}{\partial \bar{\xi}_a}+\xi_b\frac{\partial}{\partial \xi_b}-\bar{\xi}_b\frac{\partial}{\partial \bar{\xi}_b}\right)\Psi(\xi_a,\bar{\xi}_a,\xi_b,\bar{\xi}_b)=0 \tag{32}$$

となる。

4　四次元空間中の調和振動子の問題への変換

最後に四次元空間中の表現に書き換える。これを実行するためには

$$\begin{cases} \xi_a = q_1 + \mathrm{i}q_2 \\ \xi_b = q_3 + \mathrm{i}q_4 \end{cases}$$

のように変数変換を行う。（ただし $(q_1, q_2, q_3, q_4) \in \mathbb{R}^4$）この変数変換により、式 29 は

$$\left[\frac{\partial}{\partial q_1^2} + \frac{\partial}{\partial q_2^2} + \frac{\partial}{\partial q_3^2} + \frac{\partial}{\partial q_4^2} + \lambda - \alpha^4 \left(q_1^2 + q_2^2 + q_3^2 + q_4^2\right)\right] \Psi(q_1, q_2, q_3, q_4) = 0 \tag{33}$$

となり、式 32 は

$$\left(q_1 \frac{\partial}{\partial q_2} - q_2 \frac{\partial}{\partial q_1}\right) \Psi(q_1, q_2, q_3, q_4) = -\left(q_3 \frac{\partial}{\partial q_4} - q_4 \frac{\partial}{\partial q_3}\right) \Psi(q_1, q_2, q_3, q_4) \tag{34}$$

となる。式 33 は四次元空間中の等方調和振動子の Schrödinger 方程式に他ならない。式 34 は四次元空間における角運動量を用いて、

$$L_{12}\Psi(q_1, q_2, q_3, q_4) = -L_{34}\Psi(q_1, q_2, q_3, q_4) \tag{35}$$

と表現できる。これは角運動量に関する拘束条件が課せられていることに相当する。