D次元水素様原子の非相対論的シュレディンガー方程式を考える。（束縛状態E<0）

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_e}\nabla^2-\frac{\kappa}{r}\right]\Psi(\boldsymbol{r})=E\Psi(\boldsymbol{r})$$

$$\nabla^2=\sum_{i=1}^{D}\frac{\partial^2}{\partial x_i^2}\qquad r=\sqrt{\sum_{i=1}^{D}x_i^2}\qquad \kappa=\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0}$$

波動関数のフーリエ変換を定義する。

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

シュレディンガー方程式のフーリエ変換を得る。

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

D次元空間の超球面 S^{D-1} の面積は以下のようになる。

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

エネルギーを書き換える（運動量と同様に扱う相対論的な表示）と次の式を得る。

$$p_0^2 = -2m_e E < 0$$

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

この時点で式を少し分析してみよう。

右辺は積分核 K(p,p') と波動関数の畳み込み積分である。

$$(\boldsymbol{p}^2 + p_0^2)\tilde{\psi}(\boldsymbol{p}) = \int_{\boldsymbol{R}^D} d\boldsymbol{p}'\psi(\boldsymbol{p}')K(\boldsymbol{p},\boldsymbol{p}')$$

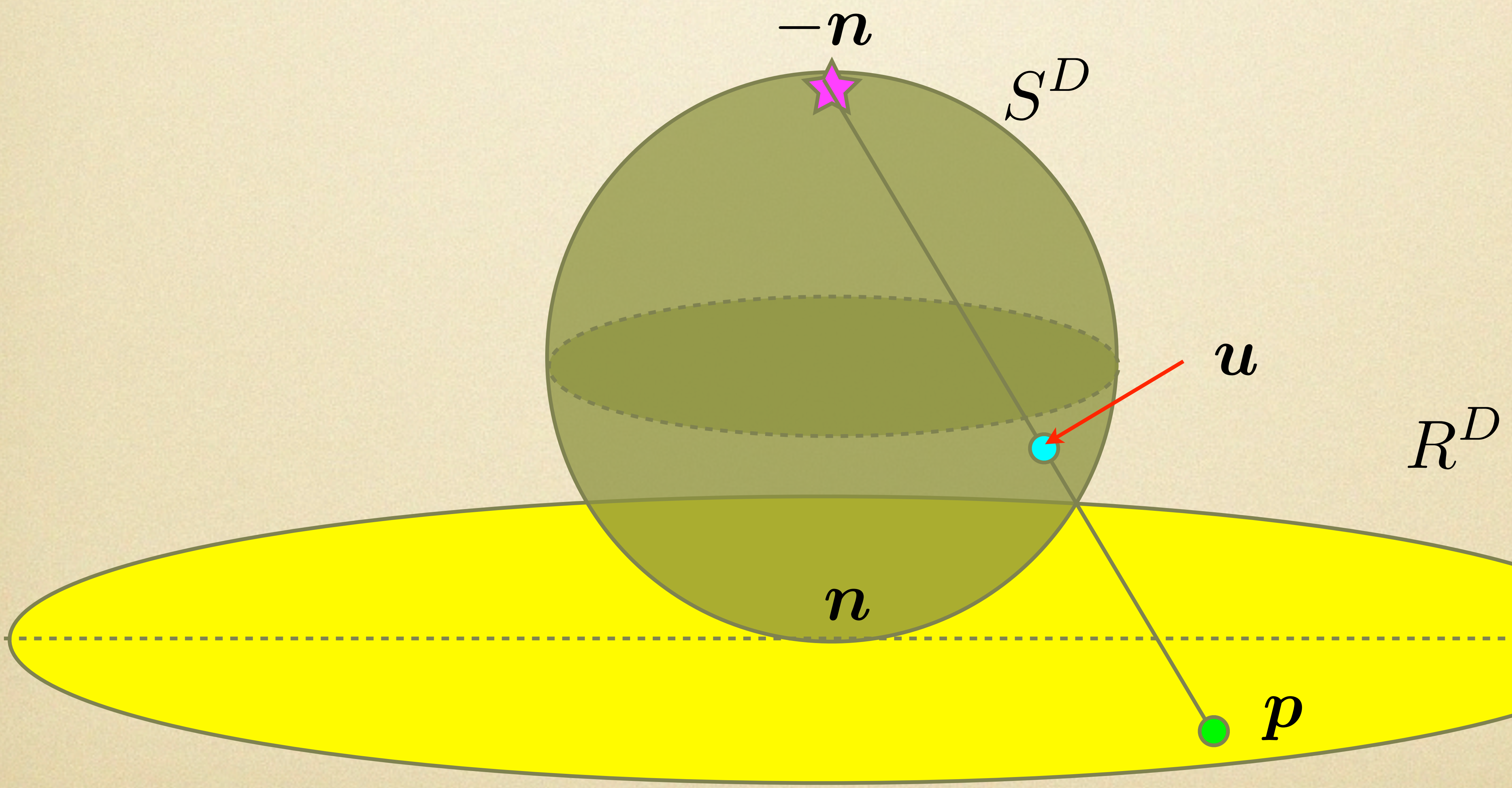
これは関数 ψ に対して畳み込み積分操作を行う演算子を作用させた場合の固有値が

$$\boldsymbol{p}^2 + p_0^2$$

となっている固有値問題として解釈可能である。

立体射影の考えにより、積分区間に関する変数変換を行う。

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



積分における測度は以下のように変換される。

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

p' の変数変換

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

を用いると、

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

となりシュレディンガー方程式は

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

となる。

波動関数を書き直すと、

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

シュレディンガー方程式は以下のようになる。

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

グリーン関数方程式

$$\Delta_{\boldsymbol{u},\boldsymbol{R}^{D+1}} G(\boldsymbol{u} - \boldsymbol{u}') = -\delta(\boldsymbol{u} - \boldsymbol{u}')$$

を満たすグリーン関数

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

を用いると、

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

という固有値問題に帰着する。

固有値問題

$$f(\boldsymbol{u}) = \lambda \int_{S^D} d\Omega(\boldsymbol{u}')\ f(\boldsymbol{u}')G(\boldsymbol{u}-\boldsymbol{u}')$$

を考える。

この固有関数が高次元球面調和関数となることを以下に示す。

高次元球面調和関数はLaplace-Beltrami演算子の固有関数である。

$$\Delta_{S^D} Y_{n\alpha}(\boldsymbol{u}) = -n(n+D-1)Y_{n\alpha}(\boldsymbol{u})$$

Laplace-Beltrami演算子はLaplacianの球面成分のみの演算子である。

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

Laplace-Beltrami演算子の固有値を同じくする固有関数が張る関数空間が定義できるが、超球面上の関数はこれらの関数空間の可算無限直和で表される。

$$L^2(S^D, d\Omega_D) = \oplus_{n=0}^{\infty}\mathcal{H}_n$$

$$\mathrm{dim}\mathcal{H}_n = {}_{n+D}C_n - {}_{n+D-2}C_{n-2}$$

D=1のときはフーリエ級数展開に他ならない。

ゲーゲンバウアー多項式を母関数のテーラ展開により定義する。

$$\frac{1}{(1-2xt+t^2)^\alpha} = \sum_{n=0}^{\infty} C_n^\alpha(x) t^n$$

上記展開式より、

$$G(\boldsymbol{u}-\boldsymbol{u}') = \frac{1}{(D-1)S_D} \sum_{n=0}^{\infty} C_n^{\frac{D-1}{2}}(\boldsymbol{u}\cdot\boldsymbol{u}')$$

が成立する。

ここでゲーゲンバウアー多項式より定義されるCn(u・u')という関数は帯球関数と呼ばれる。

帯球関数Cnの著しい性質は再生核となることである。

すなわち、$Y \in \mathcal{H}_m$に対して、

$$\delta_{mn} Y(\boldsymbol{u}) = \frac{\dim\mathcal{H}_n}{C_n^{\frac{D-1}{2}}(1) S_D} \int_{S^D} d\Omega(\boldsymbol{u}') Y(\boldsymbol{u}') C_n^{\frac{D-1}{2}}(\boldsymbol{u}\cdot\boldsymbol{u}')$$

となることである。

以下の関係式を用いると、

$$\dim\mathcal{H}_n = {}_{n+D}C_n - {}_{n+D-2}C_{n-2} = \frac{(D+2n-1)(D+n-2)!}{(D-1)!n!}$$

$$C_n^{\frac{D-1}{2}}(1) = {}_{D+n-2}C_n = \frac{(D+n-2)!}{n!(D-2)!}$$

$Y \in \mathcal{H}_m$に対して、

$$\delta_{mn} Y(\boldsymbol{u}) = \frac{(D+2n-1)}{(D-1)S_D} \int_{S^D} d\Omega(\boldsymbol{u}') Y(\boldsymbol{u}') C_n^{\frac{D-1}{2}}(\boldsymbol{u}\cdot\boldsymbol{u}')$$

となる。

グリーン関数が全ての次数の帯球関数を含むことを考慮すると、

$Y \in \mathcal{H}_m$に対して、

$$Y(\boldsymbol{u}) = (D+2n-1) \int_{S^D} d\Omega(\boldsymbol{u}') Y(\boldsymbol{u}') G(\boldsymbol{u}-\boldsymbol{u}')$$

となる。$L^2(S^D, d\Omega_D) = \oplus_{n=0}^{\infty}\mathcal{H}_n$ では球面調和関数は完全直交基底となるので、このヒルベルト空間では固有値・固有関数の組はこれらに限られる。

以上より

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

を得る。

D次元水素様原子の非相対論的束縛状態エネルギースペクトルは

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

縮重度は

$$\mathrm{dim}\mathcal{H}_n = {}_{n+D}C_n - {}_{n+D-2}C_{n-2} = \frac{(D+2n-1)(D+n-2)!}{(D-1)!n!}$$

となる。