物理学演習 III（量子力学）　　No. 6　　2016. 5. 24

1. 【水素原子 (後半)】

その場演習 No. 6 で導出したように、水素原子の動径方向の波動関数を次の形に変形することができた：

$$\frac{d^2 f(\rho)}{d\rho^2} + \left(\frac{2}{\rho} - 1\right)\frac{df(\rho)}{d\rho} + \left\{\frac{\lambda - 1}{\rho} - \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2}\right\} f(\rho) = 0. \tag{1}$$

(1) 波動関数 $f(\rho)$ が

$$f(\rho) = \rho^s \sum_{n=0}^{\infty} C_n \, \rho^n \tag{2}$$

と展開されるとして、式 (1) に代入して ρ のベキについて整理せよ。

(2) 方程式が恒等的に成立するためには、前問の各ベキの係数がゼロにならなければならない。ただし $C_0 \neq 0$ としている。$f(\rho)$ が原点で正則であることを考慮して、

$$s = \ell, \qquad \text{および} \qquad C_{n+1} = \frac{n + \ell + 1 - \lambda}{(n+1)(n+2\ell+2)} C_n.$$

が得られることを確認せよ。

(3) これらを

$$F(\rho) = \sum_{n=0}^{\infty} C_n \, \rho^n$$

に代入したものと、合流型超幾何関数 $F(a, c; \rho)$

$$F(a, c; \rho) = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \frac{(a+n-1)(a+n-2)\cdots a}{(c+n-1)(c+n-2)\cdots c} \rho^n$$

とを見比べ、$a,\ c$ が ℓやλ を用いて

$$a = \ell + 1 - \lambda, \quad c = 2\ell + 2$$

と書けることを確認せよ。

(4) 一般に、$F(a, c; \rho)$ は a が 0 または負の整数の時に多項式になり、そうでないときには無限級数となる。a, c が実数の時、この無限級数は $\rho \to \infty$ で $\exp(\rho/2)$ よりも収束が悪いので（詳細は物理数学の参考書などを参照)、$R(\rho/\alpha)$ が束縛状態の波動関数であるためには a が 0 または負の整数でなければならない。

いま、

$$a = \ell + 1 - \lambda = -k \quad (k = 0, 1, 2, \cdots)$$

とおくと、エネルギー E は

$$E = -\frac{me^4}{2\hbar^2 (k + \ell + 1)^2}$$

となることを確認せよ。

ここで、あらためて $n \equiv k + \ell + 1$ $(n = 1, 2, \cdots)$ とおいたものを主量子数と呼ぶ。ただし、この n と問題 (1) のベキ n と混同しないように注意すること。また、$F(a, c; \rho) = F(-k, c; \rho) = F(-(n - \ell - 1), 2\ell + 2; \rho)$ は、 Laguerre の陪多項式 $L^{2\ell+1}_{n-\ell-1}(\rho)$ に一致する。

2. 【合流型超幾何関数】

微分方程式

$$\left[z\frac{d^2}{dz^2}+(\gamma-z)\frac{d}{dz}-\alpha\right]u(z)=0 \tag{3}$$

を考える。

(1) 形式的な無限級数

$$u(z)=z^{\rho}\left(1+\sum_{n=1}^{\infty}c_n z^n\right)$$

の形を式 (3) に代入することで、パラメーター ρ の関係式

$$\rho\,(\rho+\gamma-1)=0 \tag{4}$$

と係数 c_n に関する漸化式

$$\begin{aligned}&(\rho+\gamma)(\rho+1)c_1=\rho+\alpha,\\&(\rho+n+\gamma)(\rho+n+1)c_{n+1}=(\rho+n+\alpha)c_n,\quad (n=1,2,\cdots)\end{aligned}$$

を導け。

(2) 式 (4) から得られる ρ についての 2 つの解それぞれに対して上の漸化式を解いて、この形式解が

$$\begin{aligned}u_1(z)&=1+\sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{n!}\frac{(\alpha+n-1)(\alpha+n-2)\cdots\alpha}{(\gamma+n-1)(\gamma+n-2)\cdots\gamma}z^n\equiv F(\alpha,\gamma;z)\\u_2(z)&=z^{1-\gamma}\left[1+\sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{n!}\frac{(\alpha-\gamma+n)(\alpha-\gamma+n-1)\cdots(\alpha-\gamma+1)}{(-\gamma+n+1)(-\gamma+n)\cdots(2-\gamma)}z^n\right]\\&=z^{1-\gamma}F(\alpha-\gamma+1,2-\gamma;z)\end{aligned}$$

と求まることを確かめなさい。

ここで定義された関数 $F(\alpha,\gamma;z)$

$$F(\alpha,\gamma;z)=1+\sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{n!}\frac{(\alpha+n-1)(\alpha+n-2)\cdots\alpha}{(\gamma+n-1)(\gamma+n-2)\cdots\gamma}z^n$$

は合流型超幾何関数と呼ばれている。γ が 0 か負の整数の場合には、係数の分母が 0 になっているので、この関数は意味をもたない。それ以外の場合には、この無限級数は $|z|<\infty$ で収束しているので、合流型超幾何微分方程式の解を与えていることがわかる。したがって、$\gamma=0,-1,-2,\cdots$ の場合は $u_1(z)$ が意味を失い、$\gamma=2,3,4,\cdots$ の場合には $u_2(z)$ が意味を失うが、それ以外では $\gamma=1$ を除いて $u_1(z)$ と $u_2(z)$ が線形独立な解を与えており、すべての解はこれらの線形結合で表すことできる。