

1 Dirac 方程式の水素原子

ここでは、Dirac 方程式を用いて水素原子、厳密に言えば Coulomb ポテンシャル中の電子のエネルギー固有値と固有状態を求める。これには大きく分けて次の4つのステップを踏んでいく。

1. 対称性を用いた、角度方向の波動関数の基底の整備
2. 動径方向の微分方程式の導出
3. 動径方向の微分方程式の解
4. 無限遠での振る舞いとエネルギー固有値

これらを順に見ていくわけだが、その前に convention をまとめておく。

計量とガンマ行列

$$\eta_{\mu\nu} = \eta^{\mu\nu} = \text{diag}(+1, -1, -1, -1), \quad \{\gamma^\mu, \gamma^\nu\} = 2\eta^{\mu\nu}, \quad \alpha_i = \gamma^0 \gamma^i, \quad \beta = \gamma^0$$

電磁場中の Dirac 方程式

$$(i\gamma^\mu D_\mu - m)\psi = 0, \quad D_\mu \psi := \partial_\mu \psi + iqA_\mu \psi, \quad (q: \text{電荷})$$

あるいは

$$i\partial_0 \psi = H\psi, \quad H = -i\alpha_i(\partial_i + iqA_i) + m\beta + qA_0$$

軌道角運動量とスピン

$$L_i = -i\epsilon_{ijk}x^j\partial_k, \quad S_i = -\frac{i}{4}\epsilon_{ijk}\alpha_j\alpha_k = \frac{i}{4}\epsilon_{ijk}\gamma^j\gamma^k.$$

1.1 対称性を用いた、角度方向の波動関数の基底の整備

Dirac 方程式は電子などのスピン $\frac{1}{2}$ の粒子を記述する。このため軌道角運動量 \mathbb{L} だけでは保存せず、スピン角運動量 \mathbb{S} と合わせた全角運動量 $\mathbb{J} = \mathbb{L} + \mathbb{S}$ が保存する。まずは、 \mathbb{J} の既約表現の基底 $|j, m\rangle$ を \mathbb{L} の既約表現の基底 $|l, m_l\rangle$ と \mathbb{S} の既約表現の基底 $|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle$ を用いて表

すことを考えよう。これらは次の式を満たす。

$$L_3 |l, m_l\rangle = m_l |l, m_l\rangle, \quad \mathbb{L}^2 |l, m_l\rangle = l(l+1) |l, m_l\rangle, \quad L_- |l, m_l\rangle = \sqrt{(l+m_l)(l+1-m_l)} |l, m_l\rangle,$$

$$J_3 |j, m\rangle = m |j, m\rangle, \quad \mathbb{J}^2 |j, m\rangle = j(j+1) |j, m\rangle, \quad J_- |j, m\rangle = \sqrt{(j+m)(j+1-m)} |j, m\rangle,$$

$$S_3 |\uparrow\rangle = +\frac{1}{2} |\uparrow\rangle, \quad S_3 |\downarrow\rangle = -\frac{1}{2} |\downarrow\rangle, \quad S^2 |\uparrow\rangle = \frac{3}{4} |\uparrow\rangle, \quad S^2 |\downarrow\rangle = \frac{3}{4} |\downarrow\rangle, \quad S_- |\uparrow\rangle = |\downarrow\rangle.$$

これらの基底はすべて正規化されている。

さて、スピン l ($l > 0$) 表現とスピン $\frac{1}{2}$ 表現のテンソル積の既約分解を考えると

$$l \otimes \frac{1}{2} = (l + \frac{1}{2}) \oplus (l - \frac{1}{2})$$

となるので、 $j = l + \frac{1}{2}$ と $j = l - \frac{1}{2}$ の 2 種類の既約表現が現れる。 $l = 0$ の場合は $j = \frac{1}{2}$ 表現のみが現れる。この分解での基底の対応を見てみよう。すぐに分かるのは J_3 の固有値は最大で $l + \frac{1}{2}$ なので、この状態は $j = l + \frac{1}{2}$ 表現の最高ウェイト状態になっている。つまり

$$\left| j = l + \frac{1}{2}, m = l + \frac{1}{2} \right\rangle = |l, l\rangle \otimes |\uparrow\rangle$$

である。 $j = l + \frac{1}{2}$ 表現の他の状態は、この最高ウェイト状態に J_- をかけていくことによって得られる。例えば

$$\begin{aligned} \left| j = l + \frac{1}{2}, m = l - \frac{1}{2} \right\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2l+1}} J_- \left| j = l + \frac{1}{2}, m = l + \frac{1}{2} \right\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{2l+1}} \left(\sqrt{2l} |l, l-1\rangle \otimes |\uparrow\rangle + |l, l\rangle \otimes |\downarrow\rangle \right) \end{aligned} \quad (1)$$

となる。ところで $l \otimes \frac{1}{2}$ の状態の中で、 J_3 の固有値 m が $m = l - \frac{1}{2}$ となる状態がもう一つある。これは $m = l + \frac{1}{2}$ の状態が 1 つしかないことを考慮すると、 $j = l - \frac{1}{2}$ 表現の最高ウェイト状態である。これは、(1) の状態に直交し正規化するようにとると

$$\left| j = l - \frac{1}{2}, m = l - \frac{1}{2} \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2l+1}} \left(|l, l-1\rangle \otimes |\uparrow\rangle - \sqrt{2l} |l, l\rangle \otimes |\downarrow\rangle \right)$$

となる。これに J_- をかけていくことにより、 $|j = l - \frac{1}{2}, m\rangle$ のすべての状態が得られる。具体的に $j = l + \frac{1}{2}$ の表現の基底は

$$|j, m\rangle_+ = \frac{1}{\sqrt{2j}} \left(\sqrt{j+m} \left| j - \frac{1}{2}, m - \frac{1}{2} \right\rangle \otimes |\uparrow\rangle + \sqrt{j-m} \left| j - \frac{1}{2}, m + \frac{1}{2} \right\rangle \otimes |\downarrow\rangle \right)$$

であり、 $j = l - \frac{1}{2}$ 表現の基底は

$$|j, m\rangle_- = \frac{1}{\sqrt{2j}} \left(\sqrt{j+1-m} \left| j + \frac{1}{2}, m - \frac{1}{2} \right\rangle \otimes |\uparrow\rangle + \sqrt{j+1+m} \left| j + \frac{1}{2}, m + \frac{1}{2} \right\rangle \otimes |\downarrow\rangle \right)$$

となる。もし、座標表示の球面調和関数の方が馴染みがあるなら、球面上の座標基底 $\langle \theta, \varphi |$ を導入すると

$$\langle \theta, \varphi | l, m_l \rangle = Y_l^{m_l}(\theta, \varphi)$$

により、今の基底を球面調和関数を用いて表すことができる。

ここでひとつ問題がある。空間の回転 $SU(2)$ の表現のみで分類するかぎり、 j, m が同じなら、 $l = j - \frac{1}{2}$ から来た状態と $l = j + \frac{1}{2}$ から来た状態、つまり上の $|j, m\rangle_{\pm}$ の状態は区別できないことになる。言い換えれば、Hamiltonian を対角化する基底は、これらが混じったものになる可能性がある。幸運なことに、球対称ポテンシャル中の Dirac 方程式はパリティ（空間反転）で不変であるので、次のようにパリティによって区別することができる。パリティ演算子 P は $P^2 = 1$ を満たす。座標 x^i や運動量 p^i に対して

$$Px^iP = -x^i, \quad Pp^iP = -p^i$$

のように作用する。したがって角運動量演算子 $\mathbb{L}, \mathbb{S}, \mathbb{J}$ とはすべて交換する。また座標基底 $|\theta, \varphi\rangle$ に対して

$$P|\theta, \varphi\rangle = |\pi - \theta, \varphi + \pi\rangle$$

と作用する。したがって

$$P|l, m_l\rangle = (-1)^l |l, m_l\rangle$$

と作用することが分かる。スピンの基底 $|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle$ はパリティで不変であるとすることができる。したがって

$$P|j, m\rangle_{\pm} = (-1)^{j \mp \frac{1}{2}} |j, m\rangle_{\pm}$$

のように2つの状態を区別することができる。

1.2 動径方向の微分方程式の導出

球対称ポテンシャル中の電子を考えたいので、 $qA_0 = V(r)$ が r のみによろし、 $A_i = 0$ とする。このとき、Dirac 方程式は

$$i\partial_t\psi = H\psi, \quad H = \alpha_i p^i + m\beta + V(r), \quad (\beta = \gamma^0, \alpha_i = \gamma^0\gamma^i)$$

と書ける。この H を対角化するというのが今考えたい問題である。つまり

$$H\psi = E\psi \tag{2}$$

という方程式を考えたい。

今、座標表示の Dirac スピノール $\psi(t, \mathbf{x})$ に対して、パリティ変換 P を

$$(P\psi)(t, \mathbf{x}) = \beta\psi(t, -\mathbf{x})$$

と定義すると、 $PH = HP$ となるので、 H の固有状態を P の固有状態とすることができる。

1.1 節で考えた状態の波動関数は 2 成分であったが、Dirac スピノールは 4 成分なので、余分に状態が必要である。 β は $\mathbb{L}, \mathbb{S}, \mathbb{J}$ と可換なので、 β の固有値を用いてそれを区別することにする。つまり $|+\rangle, |-\rangle$ を

$$\beta|\pm\rangle = \pm|\pm\rangle$$

となるような状態として、Dirac スピノールの 4 成分を

$$|+\rangle|\uparrow\rangle, |+\rangle|\downarrow\rangle, |-\rangle|\uparrow\rangle, |-\rangle|\downarrow\rangle$$

の 4 つの基底で表すことにする。そうすると対称性の縛りだけから、固有状態 ψ としては

$$\psi = F_+(r)|j, m\rangle_+ \otimes |+\rangle + G_-(r)|j, m\rangle_- \otimes |-\rangle \quad (3)$$

および

$$\psi = F_-(r)|j, m\rangle_- \otimes |+\rangle + G_+(r)|j, m\rangle_+ \otimes |-\rangle \quad (4)$$

のものを考えれば十分であることが分かる。

さて、これらの表式を (2) に代入して計算するには、少し工夫が必要である。演算子

$$Q = \frac{2S_i x^i}{r}$$

を考えてみよう。今、 $2S_i$ は Pauli 行列と同じ関係

$$2S_i 2S_j = \delta_{ij} + i\epsilon_{ijk} 2S_k.$$

を満たすので、これを用いると $Q^2 = 1$ が成り立つことが分かる。これらを用いると

$$\begin{aligned} \alpha_i p^i &= \alpha_i p^i Q^2 = \alpha_i 2S_j p^j x^j \frac{Q}{r} \\ &= (\delta_{ij} \gamma_5 + i\epsilon_{ijk} \alpha_k) p^j x^j \frac{Q}{r} \\ &= (\gamma_5 p^j x^j - iL_k \alpha_k) \frac{Q}{r} \\ &= (-ir\partial_r \gamma_5 - 3i\gamma_5 - iL_k \alpha_k) \frac{Q}{r} \\ &= (-ir\partial_r - 3i - iL_k \alpha_k \gamma_5) \gamma_5 \frac{Q}{r} \end{aligned} \quad (5)$$

を得る。途中

$$\alpha_i 2S_j = \delta_{ij} \gamma_5 + i \epsilon_{ijk} \alpha_k$$

という式を用いた。この式自体は、計算で確かめることができる。その際、

$$\alpha_1 \alpha_2 \alpha_3 = i \gamma_5$$

の関係式を示して用いると便利である。

ここで Q について、もう少し考えてみよう。 Q は、エルミート演算子であって \mathbb{J}, β と可換であるが $QP = -PQ$ である。したがって \mathbb{J} の表現の基底に作用すると

$$Q |j, m\rangle_{\pm} = c_{\pm} |j, m\rangle_{\mp}$$

と書けるはずである。ここで c_{\pm} は c 数の定数である。ただし Q はエルミート演算子で $Q^2 = 1$ であることと、 $|j, m\rangle_{\pm}$ が正規直交系であることを合わせると $c_{\pm} = +1$ あるいは $c_{\pm} = -1$ である。正規直交条件を保ったままで $|l, m_l\rangle$ の位相を調整することで、すべての j, m で $c_{\pm} = 1$ にすることができる。つまり

$$Q |j, m\rangle_{\pm} = |j, m\rangle_{\mp}$$

であるとする。

次に (5) の $-iL_k \alpha_k \gamma_5$ について考えてみよう。例えば

$$\alpha_1 \gamma_5 = \gamma^{01} i \gamma^{0123} = i \gamma^{23} = 2S_1$$

となる。同様の計算で $\alpha_k \gamma_5 = 2S_k$ であることが分かる。したがって (5) は

$$\alpha_i p^i = (-i r \partial_r - 3i - i 2\mathbb{S} \cdot \mathbb{L}) \gamma_5 \frac{Q}{r} \quad (6)$$

となる。さらにスピン軌道相互作用の計算のときにやったようなトリックを用いて、この項を計算すると

$$-i 2\mathbb{S} \cdot \mathbb{L} = -i(\mathbb{J}^2 - \mathbb{L}^2 - \mathbb{S}^2) = -i(j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4})$$

となるので

$$-i 2\mathbb{S} \cdot \mathbb{L} |j, m\rangle_{\pm} = i(1 + \kappa_{\pm}) |j, m\rangle_{\pm}, \quad \kappa_{\pm} = \mp(j + \frac{1}{2})$$

と計算できる。

さらに γ_5 の取り扱いについて述べる。 γ_5 は $\mathbb{L}, \mathbb{S}, \mathbb{J}, \alpha_i, x^i, p^i$ と交換し、 β と反交換する。なので $|\pm\rangle$ に非自明に作用する。これらの状態の位相を適当に調整して

$$\gamma_5 |\pm\rangle = |\mp\rangle$$

となるようにする。

さて、(3),(4) を (2) に代入しよう。書く量を減らすために、(3) の場合には、 $\kappa = \kappa_+ = -(j+\frac{1}{2})$ と書くことにし、下付きの \pm を省略する。 $\gamma_5 Q$ に関して

$$\gamma_5 Q |j, m\rangle_+ \otimes |+\rangle = |j, m\rangle_- \otimes |-\rangle, \quad \gamma_5 Q |j, m\rangle_- \otimes |-\rangle = |j, m\rangle_+ \otimes |+\rangle$$

であることに注意する。(2) は

$$(E - m\beta - V)\psi = \alpha_i p^i \psi$$

となる。(3) を代入すると、左辺は

$$(\text{左辺}) = (E - m - V)F(r) |j, m\rangle_+ \otimes |+\rangle + (E + m - V)G(r) |j, m\rangle_- \otimes |-\rangle \quad (7)$$

であり、右辺は (6) を用いて計算すると

$$\begin{aligned} (\text{右辺}) &= \alpha_i p^i (F(r) |j, m\rangle_+ \otimes |+\rangle + G(r) |j, m\rangle_- \otimes |-\rangle) \\ &= (-ir\partial_r - 3i - i2\mathbb{S} \cdot \mathbb{L}) \gamma_5 \frac{Q}{r} (F(r) |j, m\rangle_+ \otimes |+\rangle + G(r) |j, m\rangle_- \otimes |-\rangle) \\ &= (-ir\partial_r - 3i - i2\mathbb{S} \cdot \mathbb{L}) \frac{1}{r} (G(r) |j, m\rangle_+ \otimes |+\rangle + F(r) |j, m\rangle_- \otimes |-\rangle) \\ &= (-ir\partial_r - 2i + i\kappa) \frac{1}{r} G(r) |j, m\rangle_+ \otimes |+\rangle + (-ir\partial_r - 2i - i\kappa) \frac{1}{r} F(r) |j, m\rangle_- \otimes |-\rangle \quad (8) \end{aligned}$$

となる。(8) と (7) を比較して

$$\begin{aligned} (E - m - V)F(r) &= (-ir\partial_r - 2i + i\kappa) \frac{1}{r} G(r), \\ (E + m - V)G(r) &= (-ir\partial_r - 2i - i\kappa) \frac{1}{r} F(r) \end{aligned}$$

を得る。少し整理するために

$$F(r) = \frac{f(r)}{r}, \quad G(r) = -i \frac{g(r)}{r}$$

として代入し、計算すると

$$\begin{aligned} (E - m - V)f(r) &= -g'(r) + \frac{\kappa}{r} g(r), \\ (E + m - V)g(r) &= f'(r) + \frac{\kappa}{r} f(r) \quad (9) \end{aligned}$$

を得る。

(4) を代入したのも全く同じ計算になり、(9) で κ が κ_- であるだけである。

ここまでは、一般の球対称ポテンシャルの場合に成り立つ式である。これから特に Coulomb ポテンシャルの場合に、この動径方向の方程式を解く。

1.3 動径方向の微分方程式の一般解

e を素電荷とし、電荷 Ze の原子核が作る Coulomb ポテンシャルを考える。 Z は原子番号であり、 $Z = 1$ が水素原子である。Coulomb ポテンシャルは

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} = -\frac{Z\alpha}{r}$$

となる。ここで α は微細構造定数と呼ばれる無次元の定数で、 c, \hbar をあらわに書くと

$$\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar c} \cong \frac{1}{137}$$

である*1。このポテンシャルを (9) に代入したものは、

$$\begin{aligned} \left(E - m + \frac{Z\alpha}{r}\right)f(r) &= -g'(r) + \frac{\kappa}{r}g(r), \\ \left(E + m + \frac{Z\alpha}{r}\right)g(r) &= f'(r) + \frac{\kappa}{r}f(r) \end{aligned} \quad (10)$$

となる。

この式を解くためのヒントを得るために $r \sim 0$ 付近を考えてみよう。べき級数で展開できるとして

$$f = r^\lambda(a_0 + a_1 r + \dots), \quad g = r^{\lambda'}(b_0 + b_1 r + \dots) \quad (a_0 \neq 0, b_0 \neq 0)$$

を代入してみる。まず、(10) の上の式は

$$Z\alpha a_0 r^{\lambda-1} + \dots = -\lambda' b_0 r^{\lambda'-1} + \kappa b_0 r^{\lambda'-1} + \dots \quad (11)$$

となる。この式で $\lambda < \lambda'$ を仮定すると $a_0 \neq 0$ と矛盾するので $\lambda \geq \lambda'$ が言える。一方、(10) の下の式は、

$$Z\alpha b_0 r^{\lambda'-1} + \dots = \lambda_0 r^{\lambda-1} + \kappa a_0 r^{\lambda-1} + \dots \quad (12)$$

*1 ここでは ϵ_0 は残したが、 $\epsilon_0 = 1$ となるような単位を選ぶと便利であることが多い。あるいは、そのかわりに $e = 1$ となる単位を選ぶのが便利な場合もある。

となる。同様の議論で $\lambda \leq \lambda'$ が言える。上と合わせると $\lambda = \lambda'$ であることが言える。式 (11) と (12) から

$$Z\alpha a_0 = -\lambda b_0 + \kappa b_0, \quad Z\alpha b_0 = \lambda a_0 + \kappa a_0$$

という関係を得る。この式が $a_0 \neq 0, b_0 \neq 0$ の階を持つための必要条件は、

$$(Z\alpha)^2 + (\lambda - \kappa)(\lambda + \kappa) = 0$$

である。 $\lambda < 0$ は原点付近で規格化可能でなくなる可能性があるので

$$\lambda = \sqrt{\kappa^2 - (Z\alpha)^2}$$

とする。結論として $r \sim 0$ 付近で

$$f, g \sim r^\lambda = r^{\sqrt{\kappa^2 - (Z\alpha)^2}}$$

である。

次に $r \rightarrow \infty$ での振る舞いを見てみよう。(10) で $r \rightarrow \infty$ を考えると

$$(E - m)f = -g' + \frac{\kappa}{r}g, \quad (E + m)g = f' + \frac{\kappa}{r}f \quad (13)$$

となる。 g を消去すると f に関する2階の微分方程式

$$f'' = \omega^2 f, \quad \omega = \sqrt{m^2 - E^2}$$

が得られる。今、束縛状態を考えているので $E < m$ であることに注意する。この微分方程式の解は、 $e^{\pm\omega r}$ であるが、今は規格化可能な解を考えたいので $e^{-\omega r}$ の方を考える。また (13) の右の式を考えると

$$(E + m)g \cong f' \cong -\omega f$$

である。

これらすべてを合わせると次のような未知関数の変換 $(f, g) \rightarrow (u, v)$ をすると見通しがよくなるのが推測できる。

$$f = r^\lambda e^{-\omega r} u, \quad g = -\frac{\omega}{E + m} r^\lambda e^{-\omega r} v. \quad (14)$$

これを (10) に代入すると

$$\begin{aligned} \left(1 + \frac{1}{E - m} \frac{Z\alpha}{r}\right) u &= v - \frac{v'}{\omega} + \frac{\kappa - \lambda}{\omega r} v, \\ \left(1 + \frac{1}{E + m} \frac{Z\alpha}{r}\right) v &= u - \frac{u'}{\omega} - \frac{\kappa + \lambda}{\omega r} u \end{aligned}$$

を得る。さらに独立変数も無次元のものにしておくのがよい。 $x = 2\omega r$ として代入し、整理すると

$$\begin{aligned} \frac{dv}{dx} + \frac{u-v}{2} + \frac{1}{x}((\lambda - \kappa)v + Bu) &= 0, \\ \frac{du}{dx} - \frac{u-v}{2} + \frac{1}{x}((\lambda + \kappa)v + Au) &= 0, \quad A := \frac{\omega Z \alpha}{E + m}, \quad B := \frac{\omega Z \alpha}{E - m} \end{aligned} \quad (15)$$

を得る。

さて、改めて (15) をべき級数の方法で解こう。すでに指数は引き抜いてあるので

$$u = \sum_{n=0}^{\infty} a_n x^n, \quad v = \sum_{n=0}^{\infty} b_n x^n$$

を (15) に代入する。 x の 0 次の項から

$$(\lambda + \kappa)a_0 + Ab_0 = 0, \quad (\lambda - \kappa)b_0 + Ab_0 = 0 \quad (16)$$

を得る。 $n = 1, 2, 3, \dots$ からは

$$\begin{aligned} na_n - \frac{1}{2}(a_{n-1} - b_{n-1}) + (\lambda + \kappa)a_n + Ab_n &= 0, \\ nb_n + \frac{1}{2}(a_{n-1} - b_{n-1}) + (\lambda - \kappa)b_n + Ba_n &= 0 \end{aligned} \quad (17)$$

を得る。この2つの式を足し算すると a_{n-1}, b_{n-1} が消え、 a_n と b_n の関係式

$$\frac{a_n}{n + \lambda - \kappa + A} = \frac{-b_n}{n + \lambda + \kappa + B}$$

が得られる。この両辺を c_n と定義する。つまり

$$a_n = (n + \lambda - \kappa + A)c_n, \quad b_n = -(n + \lambda + \kappa + B)c_n \quad (18)$$

と書ける。ここで $n = 0$ とおいたものは確かに (16) の解になっている。特に $c_0 = 1$ として差し支えない。このとき

$$AB = -(Z\alpha)^2, \quad \lambda^2 - \kappa^2 + (Z\alpha)^2 = 0$$

などの関係式に注意する。

さて、 c_n を求めよう。(18) を (17) に代入して整理すると

$$c_n = \frac{a + n - 1}{n(b + n - 1)} c_{n-1}, \quad a := \lambda + \frac{1}{2}(A + B), \quad c := 2\lambda + 1 \quad (19)$$

と書くことができる。 $c_0 = 1$ として

$$c_n = \frac{(a)_n}{(c)_n n!}$$

と求まる。ここでは Pochhammer 記号

$$(a)_n := a(a+1)(a+2)\dots(a+n-1)$$

を導入した。この c_n は合流型超幾何関数の係数であり、べき級数

$$\sum_{n=0}^{\infty} c_n x^n = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(a)_n}{(c)_n n!} x^n =: {}_1F_1(a, c; x) \quad (20)$$

は合流型超幾何関数である。

ここまで来れば u, v は合流型超幾何関数を用いて表せる。

$$u = \sum_{n=0}^{\infty} a_n x^n = \sum_{n=0}^{\infty} (n + \lambda - \kappa + A) c_n x^n = x^{1-(\lambda-\kappa+A)} \frac{\partial}{\partial x} \left(x^{\lambda-\kappa+A} {}_1F_1(a, c; x) \right),$$

$$v = \sum_{n=0}^{\infty} b_n x^n = - \sum_{n=0}^{\infty} (n + \lambda + \kappa + B) c_n x^n = -x^{1-(\lambda+\kappa+B)} \frac{\partial}{\partial x} \left(x^{\lambda+\kappa+B} {}_1F_1(a, c; x) \right).$$

1.4 無限遠での振る舞いとエネルギー固有値

さて、波動関数は合流型超幾何関数で書けることが分かったが、その $r \rightarrow \infty$ の振る舞いについてもう一度考えてみよう。まず、無限級数 (20) の収束半径は無限大であり、すべての複素数 x に対して収束することに注意する。漸化式 (19) は n が大きいときには

$$c_n \cong \frac{1}{n} c_{n-1}$$

と振る舞うので、

$$c_n \sim \frac{1}{n!}$$

である。つまり x が大きいときには

$${}_1F_1(a, c; x) \sim e^x = e^{2\omega r}$$

と振る舞う。これは、 u, v の定義 (14) を考慮しても $f, g \sim e^{\omega r}$ と指数関数的に増大する。これは今求めたい解ではない。

この指数関数的増大が起こらないのは、無限級数 (20) が途中で切れて、多項式になる場合のみである。この条件からあり得るエネルギー固有値が出てくる。途中で切れるのは、

$$-a = n' = 0, 1, 2, 3 \dots$$

の場合なので、これからエネルギー固有値を見てみよう。まず、 A, B の定義を代入すると

$$\frac{1}{2}(A + B) = -\frac{EZ\alpha}{\omega}$$

と計算できるので、多項式になる条件 $-a = n'$ は

$$\frac{EZ\alpha}{\omega} = \lambda + n'$$

と書き換えられる。両辺2乗し、 $\omega = m^2 - E^2$ であること、および $\lambda = \sqrt{\kappa^2 - (Z\alpha)^2}$ の中には E は入っていないことに注意して E について解くと*2

$$E = \frac{m}{\sqrt{1 + \left(\frac{Z\alpha}{n'+\lambda}\right)^2}}$$

が得られる。よく使われる主量子数にあたるものは、

$$n = n' + |\kappa| = n' + j + \frac{1}{2}$$

である。 $\lambda = \sqrt{\kappa^2 - (Z\alpha)^2}$, $\kappa = \pm(j + \frac{1}{2})$ も代入すると最終的な表式

$$E = \frac{m}{\sqrt{1 + \left(\frac{Z\alpha}{n-j-\frac{1}{2} + \sqrt{(j+\frac{1}{2})^2 - (Z\alpha)^2}}\right)^2}}$$

が得られる。

*2 もちろん今は正エネルギー解 $E > 0$ を考えている。