二中心問題ハ量子力學ニオケル諸問題中、exactニトキウル一ツノ場合デアル。即チ此ノ場合ノwave equationハ古典力學ニオケルHamilton-Jacobiノpartial differential equationト同様ニ、elliptic coordinatesヲ用キルト、各variablesニseparateスルコトガ出来テ、Eigenfunktion及ビEigenwertヲ決定スルコトガ可能トナル。

コレハ三体問題ノ特別ナ、唯一ノ正確ニ解キウル場合デアル。三ツノparticlesアル時、其ノ内ノ二ツノ質量ガ残リノ一ツノ質量ニ比シテ非常ニ大キイ時ニハ、此ノ二ツヲfixed centreト考ヘルコトガ出来ル、従ッテ二中心問題ニreduceサル、ハ古典力學ニオケルトカハリハナイ。

実際問題トシテハ、最モ簡単ナノハ水素分子ノionデアッテ、二ツノ同ジpoint charge $+e$ノfieldヲcharge $-e$ノ電子ガ運動スル場合デアル。一般ノ分子ニツイテモ精密ナ計算ヲスルタメニハ此ノ問題ヲ出発点トスル必要ガアルデアラウ。

以下此ノ問題ヲ少シク詳シクdiscussシテ見ヨウト思フ。

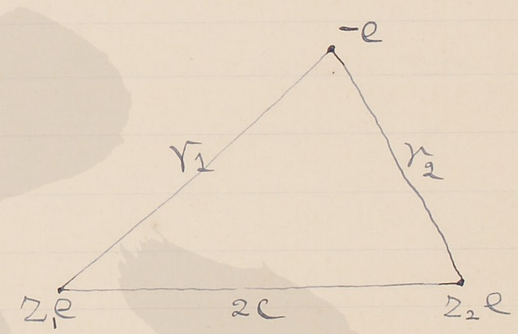
今質量夫々 M_1 M_2 m

電気量 夫々 Z_1e Z_2e $-e$

ナル三ツノparticlesガアリ、

其等ノcoordinates夫々

$(X,Y,Z)\ (X',Y',Z')\ (x,y,z)$



相互ノ距離夫々 $2c$, r_1, r_2

トスルト 此ノsystemニ対スルwave equationハ一般式

$$\operatorname{div}\operatorname{grad}\Psi + \frac{8\pi^2}{h^2}(E-V)\Psi = 0$$

ニ於テ

$$ds^2 = 2T(q_k, \dot{q}_k)\,dt^2$$
$$= M_1(dX^2+dY^2+dZ^2) + M_2(dX'^2+dY'^2+dZ'^2)$$

$+ m(dx^2+dy^2+dz^2)$

デアリ．（但シ T ハ運動ノ energy ヲアラハス）

potential energy ハ

$$V = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{2c} - \frac{Z_1 e^2}{r_1} - \frac{Z_2 e^2}{r_2}$$

デアルカラ．E' ヲ system ノ energy トスルト equation ハ

$$(1)\quad \frac{1}{M_1}\left(\frac{\partial^2\Psi}{\partial X^2}+\frac{\partial^2\Psi}{\partial Y^2}+\frac{\partial^2\Psi}{\partial Z^2}\right)+\frac{1}{M_2}\left(\frac{\partial^2\Psi}{\partial X'^2}+\frac{\partial^2\Psi}{\partial Y'^2}+\frac{\partial^2\Psi}{\partial Z'^2}\right)$$
$$+\frac{1}{m}\left(\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\Psi}{\partial y^2}+\frac{\partial^2\Psi}{\partial z^2}\right)+\frac{4\pi^2}{h^2}\left(E'-\frac{Z_1Z_2e^2}{2c}+\frac{Z_1e^2}{r_1}+\frac{Z_2e^2}{r_2}\right)\Psi$$
$$=0$$

トナル。

今 mass M_1 M_2 ガ m ニ比シテ非常ニ大キイ時ニハ first approximation トシテ第一項及ビ第二項ヲ neglect スルコトガ出来ル。従ッテ M_1 M_2 ノ間ノ距離 $2c$ ヲ parameter ト考ヘ．$E' - \frac{Z_1 Z_2 e^2}{2c} = E$ トオクト，(1) ハ

$$(2)\quad \frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\Psi}{\partial y^2}+\frac{\partial^2\Psi}{\partial z^2}+\frac{8\pi^2 m}{h^2}\left(E+\frac{Z_1e^2}{r_1}+\frac{Z_2e^2}{r_2}\right)\Psi$$
$$=0$$

トナル。Ψ ハ (x,y,z) ノ他ニ c ヲ parameter トシテフクンデ居ル。コノ parameter c ノ値ハ energy ノ E ガ minimum トナル様ニ定メレバヨイ。

wave equation (2) ヲ解クニ先立ッテ．種々ノ問題ガ special case トシテ含マレテ居ルコトヲ示サウ。

i) 先 $Z_1 = 1$，$Z_2 = 0$ トスルト charge $+e$ ナル nucleus ノマハリニ electron ガ運動スル場合即チ水素原子デアリ．

ii) $Z_1 = 2$，$Z_2 = 0$ トスルト Helium Atom ヨリ一ツノ electron ヲ取去ッタ残リ即チ Helium Ion ノ場合ヲアラハシ，

iii) $Z_1 = Z_2 = 1$ トスルト先ニ述ベタ水素分子ノ ion ノ場合トナル。
ソノ他種々ノ場合ガフクマレテ居ルガ主トシテ iii) ノ場合ガ問題トナル。

故ニ elliptic coordinates

$$\xi = \frac{r_1 + r_2}{2c} \qquad \eta = \frac{r_1 - r_2}{2c}$$

及ビ azimuth φ

$$(1 \leq \xi \leq \infty, \quad -1 \leq \eta \leq 1, \quad 0 \leq \varphi \leq 2\pi)$$

ヲ用ヰルト potential energy ハ

$$-\frac{Z_1 e^2}{r_1} - \frac{Z_2 e^2}{r_2} = \frac{-e^2}{c(\xi^2 - \eta^2)}\left[(Z_1 + Z_2)\xi - (Z_1 - Z_2)\eta\right]$$

トナリ、又 Gauss ノ theorem ニヨリ Δ_{xyz} ヲ transform スルト、(2) ハ

$$(3) \quad \frac{\partial}{\partial \xi}\left\{(\xi^2 - 1)\frac{\partial \Psi}{\partial \xi}\right\} + \frac{\partial}{\partial \eta}\left\{(1 - \eta^2)\frac{\partial \Psi}{\partial \eta}\right\} + \left\{\frac{1}{\xi^2 - 1} + \frac{1}{1 - \eta^2}\right\}\frac{\partial^2 \Psi}{\partial \varphi^2} + \frac{8\pi^2 m c^2}{h^2}\left[E(\xi^2 - \eta^2) + \frac{e^2}{c}\left\{(Z_1 + Z_2)\xi - (Z_1 - Z_2)\eta\right\}\right]\Psi = 0$$

トナル。
ソコデ variables ノ全範囲デ one valued, finite continuous ナ Ψ ノ solution ヲ求メネバナラヌ。
(3)式ハ variables ニツイテ separate サレテ居ルカラ

$$\Psi = \Phi(\varphi)X(\xi)Y(\eta)$$

トオクト、先

$$\frac{\partial^2 \Phi}{\partial \varphi^2} = -n_3^2 \Phi \qquad n_3 : \text{(positive) integer or } 0.$$

従ッテ $\Phi(\varphi) = \begin{matrix}\cos \\ \sin\end{matrix}\Big\} n_3 \varphi$

デナケレバナラヌ。
従ッテ X, Y ニツイテハ共ニ

$$(4) \quad \frac{d}{d\xi}\left\{(1 - \xi^2)\frac{dX}{d\xi}\right\} + \left\{\lambda^2 \xi^2 - \kappa \xi - \frac{n_3^2}{1 - \xi^2} + \mu\right\}X = 0$$

及ビ(5) $$\frac{d}{d\eta}\left\{(1-\eta^2)\frac{dY}{d\eta}\right\}+\left\{\lambda^2\eta^2-\kappa'\eta-\frac{n_3^2}{1-\eta^2}+\mu\right\}Y=0$$

ガ成立スル。

ココニ

$$(6)\quad\begin{cases}\lambda^2=-\dfrac{8\pi^2mc^2E}{h^2} & (\lambda>0\ \text{トシテオク})\\[2mm] \kappa=\dfrac{8\pi^2mce^2(Z_1+Z_2)}{h^2}\\[2mm] \kappa'=\dfrac{8\pi^2mce^2(Z_1-Z_2)}{h^2}\end{cases}$$

μ: arbitrary constant.

之等ノparametersハ(4)(5)ノsolutionガ $1\leq\xi\leq\infty$ $-1\leq\eta\leq1$ ノ範囲デfinite continuousトイフ條件カラ定メネバナラヌ。

茲ニノベタ種々ノspecial caseヲ考ヘテ見ルニ

i) ii) $Z_2=0$ ノ時ニハ $\kappa=\kappa'$、故ニ(4)(5)ハ同ジ式トナリ $X(\xi)$ ガ $1\leq\xi\leq\infty$ ノ範囲デboundedナsolutionヲ有シ、同時ニ $-1\leq\xi\leq1$ ニ對シテモboundedデアル時ニハ之ハ同時ニ $Y(\eta)$ ノsolutionトナル。即チparameters μ,λ ガsingle equationカラ別々ニ決定サレル場合デアル。

iii) $Z_1=Z_2=1$ ノ時ニハ $\kappa'=0$。之ノ場合ニハ(4)ハ同時ニHe-ionノ場合ヲモ表ハスカラHeノtermヲモフクム筈。更ニ(5)ノ方カラ λ,μ ノ関係ヲ知ルカラ、之ト(4)カラ得ル関係ト共ニ E, c ヲ決定シ得ル筈デアル。

以下(4)(5)ヲ別々ニトイテ λ,μ ノ関係ヲ求メテ見ル。両方カラ求メタ関係ノconsistentナモノヲ組合セレバsolutionガ得ラレル。

§ Solution of the wave equations

扨テ、先(4)ノ式ヲトツテ考ヘテ見ルニ、singular point ハ (-1), 1, ∞ デアル。ξ ヲ非常ニ大キクトルト、equation ハ asymptotically ニ

$$\frac{d^2X}{d\xi^2} + \lambda^2 X = 0$$

トナル。従ツテ ξ ノ非常ニ大ナル所デハ

$$X \backsim e^{-\lambda\xi}$$

トナル。

ソコデ
$$X = P(\xi)\cdot e^{-\lambda\xi}$$
トオクト
$$(1-\xi^2)P'' - 2\{\lambda(1-\xi^2)+\xi\}P' + \{(2\lambda-k)\xi + \lambda^2 + \mu - \frac{n_3^2}{1-\xi^2}\}P = 0$$

トナル。

次ニ $\xi = 1$ ガ singular point デアルカラ ソノ附近ノ solution ノ状態ヲ見ルト、characteristic exponent ハ $\frac{n_3}{2}$ or $-\frac{n_3}{2}$ ナルコトガ容易ニワカルカラ、solution ハ

$$(\xi-1)^{\frac{n_3}{2}} \quad \text{or} \quad (\xi-1)^{-\frac{n_3}{2}}$$

ヲ factor トシテフクム。後者ヲトルト $\xi = 1$ ガ pole トナルカラ前者ヲトル。

尚 $\xi = -1$ モ又 singular point デアリ characteristic exponent ハヤハリ $\frac{n_3}{2}$ or $-\frac{n_3}{2}$ デ solution ハ

$$(\xi+1)^{\frac{n_3}{2}} \quad \text{or} \quad (\xi+1)^{-\frac{n_3}{2}}$$

ヲ factor ニ含ム。$\xi = -1$ ハ ξ ノ interval ノ外ニアルカラ pole トナツテモ差支ヘナイカラ ソノイヅレヲトツテモヨイ。

従ツテ $$P(\xi) = (\xi^2-1)^{\frac{n_3}{2}}\, Q(\xi)$$
又ハ $$= \left(\frac{\xi-1}{\xi+1}\right)^{\frac{n_3}{2}} Q(\xi)$$

トオクコトガ出来ル。

1) 先前者ヲトルト Q ノ満足スベキ方程式ハ

$$(1-\xi^2)Q'' - 2\{(1-\xi^2)\lambda + (n_3+1)\xi\}Q'$$
$$-[\{\kappa - 2(n_3+1)\lambda\}\xi - \lambda^2 + n_3(n_3+1) - \mu]Q = 0$$

デアル。
ソコデ Q ヲ $\xi=1$ ノマハリデ power series デアラハシ
$\xi - 1 = x$, トスレバ

$$Q = \sum_{n=0}^{\infty} c_n x^n$$
$$Q' = \sum_{n=0}^{\infty} n c_n x^{n-1}$$
$$Q'' = \sum_{n=0}^{\infty} n(n-1) c_n x^{n-2}$$

方程式ヲ x デアラハスト

$$(2+x)x^2 Q'' + \{2(n_3+1) + \{2(n_3+1)-4\lambda\}x - 2\lambda x^2\}xQ'$$
$$+[\{\kappa - 2(n_3+1)\lambda - \lambda^2 + n_3(n_3+1) - \mu\}x + \{\kappa - 2(n_3+1)\lambda\}x^2]Q = 0$$

之ニ Q ノ series ヲ入レテ x ノ各 power ノ係数ヲ0トオクト
x^n ノ係数ハ

$$2n(n-1)c_n + (n-1)(n-2)c_{n-1}$$
$$2(n_3+1)nc_n + \{2(n_3+1)-4\lambda\}(n-1)c_{n-1} - 2\lambda(n-2)c_{n-2}$$
$$+\{\kappa - 2(n_3+1) - \lambda^2 + n_3(n_3+1) - \mu\}c_{n-1}$$
$$+\{\kappa - 2(n_3+1)\lambda\}c_{n-2} = 0$$

or
(8) $$2n(n+n_3)c_n + \{(n-1)(n+2n_3-4\lambda) + \kappa + (n_3-2)(n_3+1) - \lambda^2 - \mu\}c_{n-1} + \{\kappa - 2(n+n_3-1)\lambda\}c_{n-2} = 0$$

トナル。
係数ガアル power 以上デ vanish スル場合、即チ Q ガ polynomial トナル場合ニハ solution

$$X = (1-\xi^2)^{\frac{n_3}{2}} \cdot Q(\xi) \cdot e^{-\lambda\xi}$$

ハ確カニ $1 \leqq \xi$ ノ範囲デ finite, continuous デアリ、而モ ∞ デハ $e^{-\lambda\xi}$ ノ factor ノタメニ X ハ 0 ニ converge スル。
之ガ成立スルタメニハ先ヅアル n ニ於テ

$$\{\kappa - 2(n+n_3-1)\lambda\} = 0$$

トナラネバナラヌ。即チ solution ガ n_2 次ノ polynomial ト

ナルタメニハ $\quad \kappa = 2(n_2 + n_3 + 1)\lambda \quad$ n_2 ハ positive integer or 0.

デナケレバナラヌ。

コノ條件カラ energy parameter E ノ Eigenwert ガ定マル。即チ (6) カラ

$$-E = \frac{4\lambda^2}{\kappa^2}(Z_1 + Z_2)^2 \cdot E_H$$

(但シ $\quad E_H = \frac{2\pi m e^4}{h^2}$ デ水素原子ノ ionisation potential ニアタツテ居ル)

$$\therefore \quad -E = \frac{(Z_1 + Z_2)^2}{(n_2 + n_3 + 1)^2} E_H$$

$Z_2 = 0$, $\quad Z_1 = 1$ or 2 トスレバ夫々確カニ Hydrogen atom 並ニ Helium ion ノ energy level ヲ與ヘテ居ル。

係数ノ間ニ尚一ツノ條件ガアル。即チ (8) ノ式ガ

$n = 1, 2, 3, \cdots\cdots n_2 + 1$ トオイタ時，$C_0, C_1 \cdots C_n$

ニツイテ聯立ナルタメニハ determinant

$$\begin{vmatrix} \kappa + (n_3-2)(n_3+1) - \lambda^2 - \mu & 2(1+n_3) & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \kappa - 2(1+n_3)\lambda & (2+2n_3-4\lambda) + \kappa + (n_3-2)(n_3+1) - \lambda^2 - \mu & 2\cdot 2(2+n_3) & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \kappa - 2(2+n_3)\lambda & 2(3+2n_3-4\lambda) + \kappa + (n_3-2)(n_3+1) - \lambda^2 - \mu & 2\cdot 3(n_3+3) & \cdots & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & \cdots 0 & \kappa - 2(n_3+n_2)\lambda & n_2(n_2+2n_3-4\lambda) + \cdots & 2(n+1)(n+1+n_3) \end{vmatrix}$$

$= 0$

デナケレバナラヌ。

例ヘバ $n_2 = 0$ トスレバ，Ω ハ constant トナリ

$$\kappa = 2(n_3 + 1)\lambda$$

及ビ　$\kappa - 2(n_3+1)\lambda - \lambda^2 + n_3(n_3+1) - \mu = 0$

ナル條件ガ成立セネバナラヌ。之ヨリ

$$\lambda^2 - n_3(n_3+1) + \mu = 0.$$

次ニ $n_2 = 1$ トスレバ　Q ハ一次式トナリ.

$$\kappa = 2(n_3+2)\lambda$$

及ビ
$$\begin{vmatrix} \kappa + (n_3-2)(n_3+1) - \lambda^2 - \mu & 2(n_3+1) \\ \kappa - 2(n_3+1)\lambda & 2+2n_3-4\lambda+\kappa+(n_3-2)(n_3+1)-\lambda^2-\mu \end{vmatrix} = 0$$

ガ成立セネバナラヌ。之ヨリ　λ ト μ ノ関係ガ容易ニ得ラル。

$n_2 = 2$ ノ時ニツイテモ同様ニ計算ガ出来ル。

コノ X ノ solution ハ $-1 \leq \xi \leq 1$ ノ範囲デモ finite デアルカラ、$K=K'$ ノ場合 即チ one centre ノ場合ノ Y ノ solution ヲモ同時ニ與ヘテ居ル。故ニ之ハ Hydrogen atom, Helium Ion 等ノ Kepler problem ノ solution トナッテ居ル。之ヲ普通ノ polar coordinates ヲ用ヒタ時ノ solution ト比較シテ見ルコトモ出来ル。

2) 次ニ後ノ場合ヲトリ　$X = (\xi-1)^{\frac{n_3}{2}}(\xi+1)^{-\frac{n_3}{2}}Q(\xi)$ トオクト
$\xi=-1$ ガ pole ニナッテ居ルカラ、コノ solution ハ Y ノ方ニハ
適用出来ナイ。
サテ　$X' = \frac{n_3}{2}(\xi-1)^{\frac{n_3}{2}-1}(\xi+1)^{-\frac{n_3}{2}}Q - \frac{n_3}{2}(\xi-1)^{\frac{n_3}{2}}(\xi+1)^{-\frac{n_3}{2}-1}Q$
$+ (\xi-1)^{\frac{n_3}{2}}(\xi+1)^{-\frac{n_3}{2}}Q'$

$$\frac{d}{d\xi}\{(1-\xi^2)X'\} = \left\{(1-\xi^2)Q'' - 2(n_3+\xi)Q' + \frac{n_3\xi^2}{1-\xi^2}Q\right\} \times (\xi-1)^{\frac{n_3}{2}}(\xi+1)^{-\frac{n_3}{2}}$$

従ッテ方程式ハ

$$(1-\xi^2)Q'' - 2(n_3+\xi)Q' + (\lambda^2\xi^2 - \kappa\xi - n_3^2 + \mu)Q = 0$$

前ノ如ク。　$Q = e^{-\lambda\xi}P(\xi)$ トオクト．方程式ハ又

$$(1-\xi^2)P'' - 2\{\lambda(1-\xi^2) + n_3 + \xi\}P' + \{(2\lambda-\kappa)\xi + \lambda^2 + \mu - n_3^2 + 2n_3\lambda\}P = 0$$

トナル。
前ト同様ニ ~~$\xi=1$ ノ附近ノ状態ヲ見ルタメ~~ $\xi - 1 = x$ トナリ
P ガ x ノ power series ニ expand サレルトスルト．

$$-x(2+x)P'' + 2\{\lambda x(2+x) - n_3 - 1 - x\}P' + \{(2\lambda-\kappa)x + \lambda^2 + \mu - n_3^2 + 2n_3\lambda + 2\lambda - \kappa\}P = 0$$

$$P = \sum_{n=0}^{\infty} c_n x^n$$

従ッテ

$$(-2x-x^2)\sum n(n-1)c_n x^{n-2} - \{2(n_3+1) + 2(1-2\lambda)x - 2\lambda x^2\} \times \sum n c_n x^{n-1}$$
$$+ \{(2\lambda-\kappa)x + \lambda^2 + \mu - n_3^2 + 2n_3\lambda + 2\lambda - \kappa\}\sum c_n x^n = 0.$$

x^n ノ係数ヲ 0 トオクト．

$$-2(n+1)(n+n_3+1)c_{n+1} - \{n(n+1-4\lambda) - (\lambda^2 + \mu - n_3^2 + 2(n_3+1)\lambda - \kappa)\}c_n + (2\lambda n - \kappa)c_{n-1} = 0$$

前ノ如ク P ノ power ノ上ガ vanish スルタメニハ先．

$$2\lambda(m+1) - \kappa = 0 \qquad m: \text{positive integer or } 0$$

デナケレバナラヌ。コノ時 solution ハ m 次ノ polynomial
トナル。

之ノ條件カラ energy level ハ前ト同様ニ

$$-E = \frac{E_H(Z_1+Z_2)^2}{(1+n_2)^2}$$

更ニ今一ツノ條件ハ

$$\begin{vmatrix} -\{\lambda^2+\mu-n_3^2+2(n_3+1)\lambda-K\}, & -2(n_3+1) & 0 \\ 2\lambda-K & , -\{2-4\lambda-(\lambda^2+\mu-n_3^2+2(n_3+1)\lambda-K)\}, & -4(n_3+2) \\ 0 & 2\cdot 2\lambda-K & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & & \end{vmatrix} = 0$$

$n_2=0$ トスレバ. P: constant ナリ

$$2\lambda-K=0.$$

然ルニ $\lambda^2+\mu-n_3^2+2(n_3+1)\lambda-K=0$

or $\lambda^2+\mu-n_3^2+2n_3\lambda=0.$

$n_2=1$ トスレバ.

$$2\cdot 2\lambda-K=0$$

μ ヲ計算スレバ

$$\mu = 1-2n_3\lambda-\lambda^2+n_3^2 \pm \sqrt{1+4n_3\lambda+4\lambda^2}$$

次ニ (5) ノ分ノ式ヲトカネバナラヌ。先 $\varkappa'\neq 0$ ノ場合ト $\varkappa=0$ ノ場合トヲ区別スル必要ガアル。

1) $\varkappa'\neq 0$ ノ場合ニハ 前ノ X ニツイテノ (1) ノ場合ガソノマヽ適用出来ル。

即チ $Y=(1-\eta^2)^{\frac{n_3}{2}}\cdot e^{-\lambda\eta}\cdot Q(\eta)$

トオクト方程式ハ

$$(1-\eta^2)Q''-2\{(1-\eta^2)\lambda+(n_3+1)\eta\}Q'-[\{\varkappa'-2(n_3+1)\lambda\}\eta-\lambda^2+n_3(n_3+1)-\mu]Q=0$$

トナリ. 前ト同様ニ $Q(\eta)$ ガ polynomial デアルタメニハ

$$\varkappa'=2(n_1+n_3+1)\lambda$$

デナケレバナラヌ。

energy level ハコノ場合

$$-E=\frac{(Z_1-Z_2)^2}{(n_1+n_3+1)^2}E_H$$

デ与ヘラレル。

$Z_2=0$ 即チ $\varkappa=\varkappa'$ ノ場合ニハ $n_1=n_2$ トトッテ前ノ(1) ノ energy level ト一致スルノハ当然デアッテ、従ッテ各一ツノ determinant カラ得ル條件モ一致シ、之カラ求メタ μ,λ ノ関係モ前ノ場合ト全ク一致スル。従ッテ之等ノ discrete ナ値ガ equation ノ eigenwert トナル。

orbit ノ excentricity ニ当ル c ハ