水素原子がいざなう高次元の世界

2019年3月30日

Adhara (@adhara_mathphys)

@放送大学文京SC

お知らせ事項

今回出てくる水素原子は全て非相対論的です。

スピン自由度も考えません。

束縛状態(エネルギー負)のみ考えます。

途中で適宜質問して頂いて結構です。

資料は後で公開します。

1 イントロ

量子論以前:古典論では未解決だった問題

●原子周期表 Mendeleev周期表提案(1869)まだ下のような形ではなかったが



②水素原子の輝線 Balmer 系列発見(1885)

Rydbergの公式(1888)



https://ja.wikipedia.org/wiki/バルマー系列#/media/File:Emission_spectrum-H.png

前期量子論の発展と水素原子

Balmer の水素原子スペクトル系列発見(1885)

Rydbergの公式 (1888)

$$\frac{1}{\lambda} = R_{\infty} \left| \frac{1}{(n')^2} - \frac{1}{n^2} \right|$$
 Balmer系列はn=2のケース
$$R_{\infty} = \frac{m_e e^4}{8\epsilon_0^2 h^3 c} = 1.0973731568508(65) \times 10^7 \text{m}^{-1}$$
 2014 CODATA

Bohrの量子化条件(1913) 正電荷の周りを電子が回るモデルを考えた

$$m_e vr = \frac{Nh}{2\pi} \qquad N = 1, 2, 3, \dots$$

de Broglie波(物質波)(1924)

・運動量と波長を対応づけた

 $\lambda = \frac{h}{m_e v}$

- ・電子の粒子性と波動性
- ·Bohrの量子化条件はde Broglie波が定在波となる条件

量子力学の成立と水素原子

Schrödinger方程式の最初の適用例が水素原子である(1926)。

$$H\Psi(\mathbf{r}) = \left[-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m_e} - \frac{\kappa}{r} \right] \Psi(\mathbf{r}) = E\Psi(\mathbf{r}) \qquad \kappa = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0}$$

束縛状態のエネルギーは次のようになる。

$$E_N = -\frac{1}{2N^2} \frac{\kappa^2 m_e}{\hbar^2}$$

対応する波動関数は次のようになる。

$$\Psi_{Nlm}(r,\theta,\phi) = c_l e^{-\alpha_N r} \left(\alpha_N r\right)^l L_{N-l-1}^{2l+1} \left(2\alpha_N r\right) Y_{lm}(\theta,\phi) \qquad \alpha_N = \frac{\kappa m_e}{N\hbar^2}$$

ここで、Lは<u>Laguerre陪多項式</u>、Yは<u>球面調和関数</u>。

Nは主量子数、Iは角運動量量子数、mは磁気量子数と呼ばれる。

$$0 \le l \le N-1$$
 $m = -l, -l+1, \dots, l-1, l$

Rydbergの公式の導出

水素原子のエネルギー準位

$$E_N = -\frac{1}{2N^2} \frac{m_e}{\hbar^2} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\right)^2$$

を用いると、Rydbergの公式が導出できる!

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{|E_{n'} - E_n|}{hc} = \frac{m_e e^4}{8\epsilon_0^2 h^3 c} \left| \frac{1}{(n')^2} - \frac{1}{n^2} \right|$$

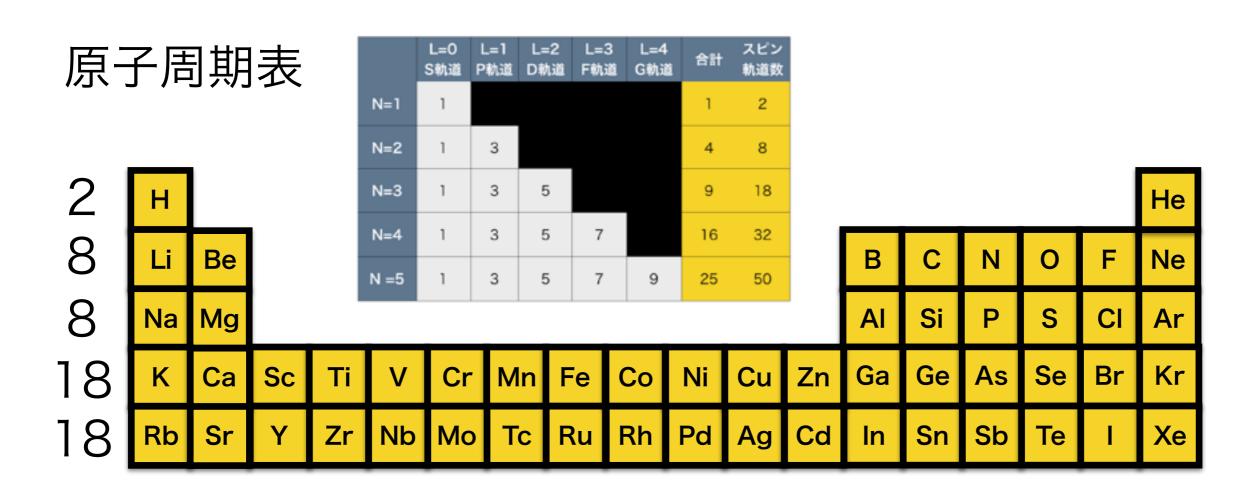


原子軌道の種類と縮退数

 N^2 $2N^2$

	L=0 S軌道	L=1 P軌道	L=2 D軌道	L=3 F軌道	L=4 G軌道	縮退数	スピン軌道数
N=1	1					1	2
N=2	7	3				4	8
N=3	7	3	5			9	18
N=4	7	3	5	7		16	32
N =5	1	3	5	7	9	25	50

原子周期表の説明



周期表の構造には水素原子の縮退数が反映されている

※実際には原子は多体系なので水素原子の結果以上のことが必要。

 $1s \rightarrow 2s \rightarrow 2p \rightarrow 3s \rightarrow 3p \rightarrow 4s \rightarrow 3d \rightarrow 4p \rightarrow 5s \rightarrow 4d \rightarrow 5p \rightarrow 6s$ の順で大まかには収容されていく。

疑問

縮退数 N^2 が生じる理屈は何だろうか? 一般には対称性があると縮退が多いことが知られている。 何の対称性だろうか?

	L=0 S軌道	L=1 P軌道	L=2 D軌道	L=3 F軌道	L=4 G軌道	合計	スピン 軌道数
N=1	1					1	2
N=2	1	3				4	8
N=3	1	3	5			9	18
N=4	1	3	5	7		16	32
N =5	1	3	5	7	9	25	50

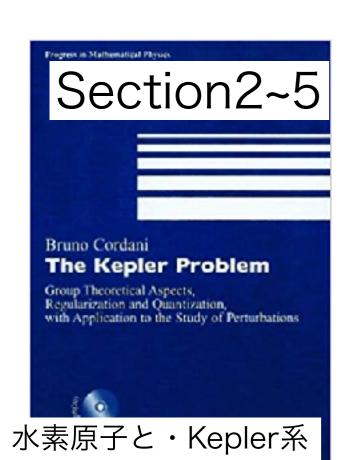
本日の内容

- 1. イントロ(済み)
- 2. Kepler系(古典力学)における保存則と対称性(手書き)
- 3. 水素原子の対称性を記述するLie代数(手書き)

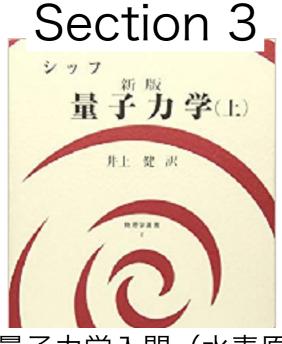
休憩

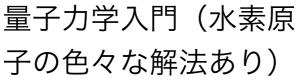
- 4. 水素原子の対称性の背後にある空間と調和解析(スライド)
- 5. 水素原子スペクトルを記述するLie代数と高次元幾何学(スライド)
- 6. 水素原子の数理の展望(スライド)

今日の話に関連する主な教科書



の数理の魔導書

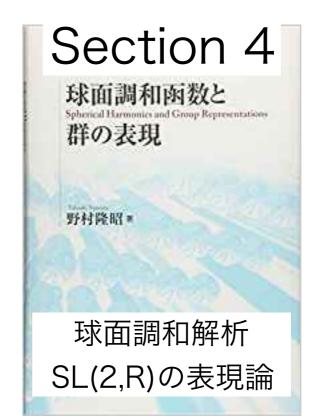




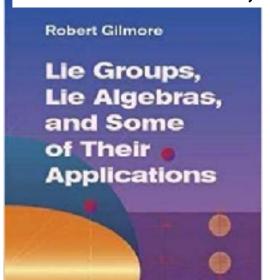


コンパクト等質空間・ 対称空間上の調和解析 (球面調和解析含)









Lie代数・Lie群・対称空 間の基本事項 水素原子関連も記載

Section 5



共形変換やツイスター空 間について詳しい

2 Kepler系(古典力学)における保存則と対称性 (板書)

ご参考 (http://adhara.hatenadiary.jp/entry/2016/06/25/120000)

3 水素原子の対称性を記述するLie代数 (板書)

ご参考 (http://adhara.hatenadiary.jp/entry/2016/04/23/155719)

4 水素原子の対称性の背後にある空間と調和解析

このセクションで解説すること

- 1.立体射影変換と一点コンパクト化によりSchrödinger 方程式をS³上の積分作用素の固有値問題になる。(V. Fockが発見した解法)
- 2.群を用いて空間を生成すること。 (等質空間)
- 3.コンパクト群の表現論の基礎とコンパクト等質空間上のPeter-Weylの定理。
- 4.Petew-Weylの定理を手掛かりに超球面上の調和解析を行ってエネルギーを求める。

Schrödinger方程式の運動量表示

水素原子の非相対論的Schrödinger方程式を考える。(E<0)

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

波動関数を運動量表示(Fourier変換)する。

$$\tilde{\psi}(\mathbf{p}) := F[\psi(\mathbf{x})](\mathbf{p})$$

$$:= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} \int_{\mathbf{R}^3} d\mathbf{x} \psi(\mathbf{x}) \exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar} \mathbf{x} \cdot \mathbf{p}\right)$$

Schrödinger方程式の運動量表示を得る。

$$\left\{\frac{\boldsymbol{p}^{2}}{2m_{e}}-E\right\}\tilde{\boldsymbol{\psi}}(\boldsymbol{p})=\frac{\kappa}{2\pi^{2}\hbar}\int_{\boldsymbol{R}^{3}}d\boldsymbol{p}'\frac{\tilde{\boldsymbol{\psi}}(\boldsymbol{p}')}{\left|\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}'\right|^{2}}$$

Schrödinger方程式の運動量表示

エネルギーを書き換えると次の式を得る。

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

$$\frac{1}{\left(\boldsymbol{p}^{2}+p_{0}^{2}\right)}\frac{m_{e}\kappa}{\pi^{2}\hbar}\int_{\boldsymbol{R}^{3}}d\boldsymbol{p}'\frac{\tilde{\boldsymbol{\psi}}\left(\boldsymbol{p}'\right)}{\left|\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}'\right|^{2}}=\tilde{\boldsymbol{\psi}}(\boldsymbol{p})$$

エネルギーと運動量を形式的に対等に扱ったと解釈できる。 cf.四元運動量

立体射影変換と一点コンパクト化

◆立体射影変換により三次元空間R3の問題が四次元空間中の 超球面S3**上の関数**の問題になる。(一点コンパクト化)

$$u = \frac{p_0^2 - p^2}{p_0^2 + p^2} n + \frac{2p_0}{p_0^2 + p^2} p$$
 $u(0) = n$
 $u(\infty) = -n$
無限遠が一点になる

19

u(0) = n

立体射影変換による方程式の書き換え

超球面上の測度と元の三次元空間上の測度の変換は次のようになる。

$$d\Omega_3(\boldsymbol{u}) = \left(\frac{2p_0}{\boldsymbol{p}^2 + p_0^2}\right)^3 d\boldsymbol{p}$$

また、

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

となりSchrödinger方程式は

$$(\mathbf{p}^{2} + p_{0}^{2}) \tilde{\psi}(\mathbf{p}) = \frac{m_{e}\kappa}{\pi^{2}\hbar} \int_{S^{3}} d\Omega_{3}(\mathbf{u}) \left(\frac{p_{0}^{2} + \mathbf{p}'^{2}}{2p_{0}}\right)^{3} \frac{1}{\left|\mathbf{u} - \mathbf{u}'\right|^{2}} \frac{(2p_{0})^{2}}{\left(p_{0}^{2} + \mathbf{p}^{2}\right) \left(p_{0}^{2} + \mathbf{p}'^{2}\right)} \tilde{\psi}(\mathbf{p}')$$

$$\succeq t \lesssim 30$$

積分作用素の固有値問題の導出

波動関数を次のように書き直し、

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

核Gを導入すると、

$$G(x) = \frac{1}{4\pi^2 |x|^2}$$

Schrödinger方程式は以下のようになる。

$$\Psi(\mathbf{u}) = \frac{2m_e \kappa}{p_0 \hbar} \int_{S^3} d\Omega (\mathbf{u}') \Psi (\mathbf{u}') G (\mathbf{u} - \mathbf{u}')$$

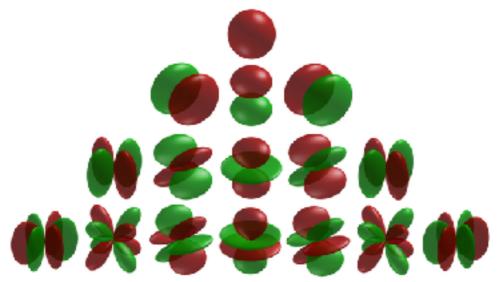
これは S^3 上の関数空間の積分作用素の固有値問題(直交関数展開)。

ところでS3上の直交関数展開とはなんだろう?

 S^1 上の直交関数はよく使う! $\cos\Theta$, $\sin 2\Theta$, $\exp(i\Theta)$, …

 S^2 上の直交関数も使う!

例えば、球面調和関数Y_{I,m}(Θ,Φ)



https://ja.wikipedia.org/wiki/球面調和関数

実は群の表現論を使うと一般的に理解できる。

S³上の直交関数展開

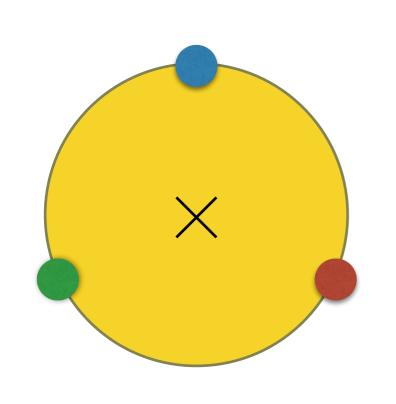
考えるべき関数空間は?

 $d\Omega_3$ を測度とした積分に関して自乗可積分な複素関数のなす関数空間を考える。 $L^2\left(S^3, d\Omega_3\right)$ なぜこれで良いのかは難しい話。

直交性とは?

$$f,g\in L^2\left(S^3,d\Omega_3\right)$$
 に対して、
$$\langle f,g\rangle = \int_{S_3} d\Omega_3(u)f(u)g^*(u)$$
 で内積を定義する。
$$\text{ この内積で定まる直交性を考える。}$$
 複素Hilbert空間となる。

球と群論



- (1)三次元空間中の球S2を想像しよう
- (2)三点を球面上にとる(どの二点を選んでも中心を通らないように)
- (3)球の中心を通る任意の軸(三点を通らなくても良い)を中心に任意角度回転させてみる。この操作を繰り返してみる。
- (4)三点の配置によって同じ回転状態を取っているかどうか判断する。

球と群論

性質(1) どんな軸をとっても360°の整数倍回転させると三点とも元の位置に戻る。

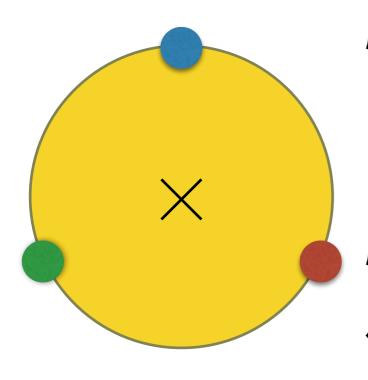
性質(2)操作を繰り返しても中心の位置は変わらないし、球は球のままである。ただし三点の位置は変わりうる。

性質(3)回転させなければ三点の位置は何も変わらない。

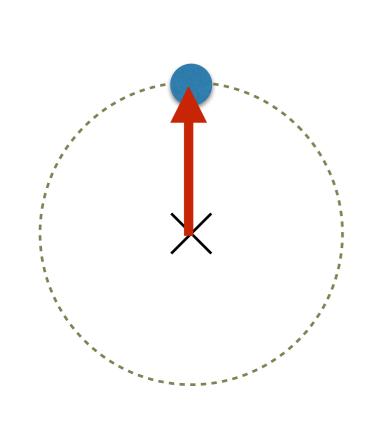
性質(4)ある軸をとってΘ回転させた後に同じ軸で-Θ回転させると元に戻る。

(2)から(4)は中心を固定した回転操作が群をなすことを言っている。この群をSO(3)という。

(1)はSO(3)が部分群SO(2)を持つことを言っている。

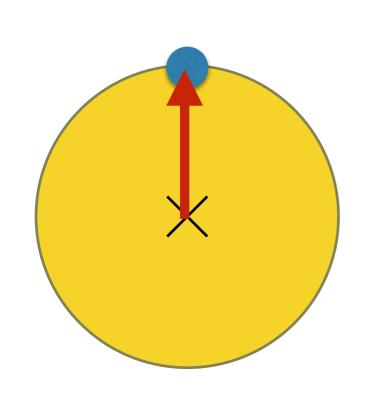


球を群論的に生成する



- (1)今度は球を無視して、青い点と元のを考える。
- (2)元の中心を回転中心としてSO(3)の操作を空間全体に対して行う。
- (3)青い点がどこに行くか、青い点と中心を結ぶ矢印がどう振る舞うかをみる。

球を群論的に生成する



性質(1)SO(3)の回転操作によって元の青い点は球上の何処かには行く。

性質(2)青い点を通る軸における回転操作に対して矢印の方向は変換しない。この回転操作は部分群SO(2)をなす。 性質(3)なんらかの回転操作をした場合の矢印の方向とその操作の後に青い点を通る任意角度の回転をした時の矢印の方

この観察は微分可能多様体として次の同型を示唆する!

 $S^2 \simeq SO(3)/SO(2)$

向は同じ。

超球面の群論的生成

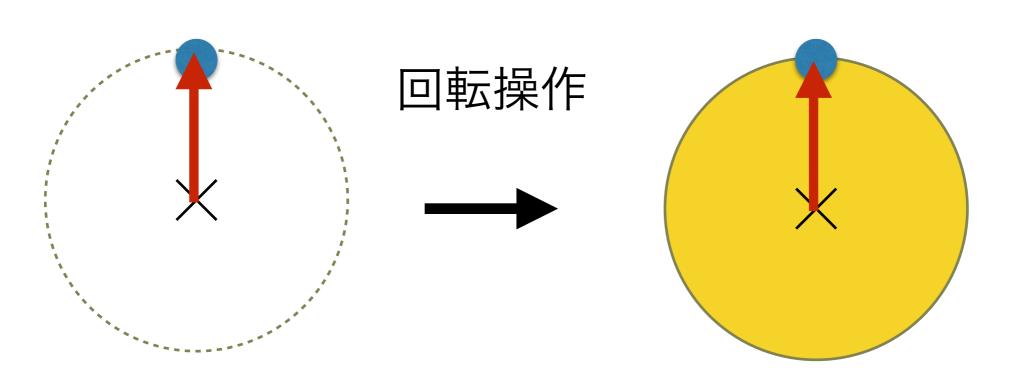
一般に次の微分可能多様体としての同型が成立する。

$$S^n \simeq SO(n+1)/SO(n)$$

特に

$$S^3 \simeq SO(4)/SO(3)$$

一般に、群を部分群で割って作る空間を等質空間という。



$$L^2(S^3, d\Omega_3)$$
 と群SO(4)

$$f \in L^2(S^3, d\Omega_3), g \in SO(4), x \in S^3$$
 に対して、

$$\left[\rho(g)f\right](x) := f(g^{-1}x)$$

で定まる $\rho(g)f$ という関数を考える。

このとき、

$$\rho(gh) = \rho(g)\rho(h), \quad \rho(g)f \in L^2(S^3, d\Omega_3)$$

となっており、

$$\rho$$
 は $SO(4) \rightarrow GL(L^2(S^3, d\Omega_3))$ という写像であり、

特に群準同型である。

位相群の表現論についていくつか準備

Gをハウスドルフ位相群、Vを複素ノルム線形空間とする。

定義

 $\rho: G \to GL(V)$ が群準同型となるかつ $G \times V \to V$ が連続

 \rightleftarrows (ρ, V) はGの連続表現(以下では単に表現という。)

定義

Vを複素Hilbert空間、〈・,・〉をエルミート内積

 (ρ, V) がGのユニタリ表現

$$\Rightarrow \forall v_1, v_2 \in V, \forall g \in G : \langle \rho(g)v_1, \rho(g)v_2 \rangle = \langle v_1, v_2 \rangle$$

既約表現と完全可約

 (ρ, V) が G の表現とする。

定義

 $W \subset V$ が G 不変部分空間

 $\Rightarrow \forall g \in G, \forall w \in W : \rho(g)w \in W$

定義

 (ρ, V) が 既約表現 \rightleftarrows V のG不変部分空間が自明定義

 (ρ, V) が完全可約表現 \Rightarrow 既約表現の直和 命題

有限次元ユニタリ表現は完全可約。

コンパクト群の有限次元表現について

以下、ハウスドルフ位相群Gをコンパクトとする。

定理

V を複素Hilbert空間とすると、

 (ρ, V) がGの表現ならばそれはユニタリ表現となる。

系

GのHilbert空間上の有限次元表現は完全可約である。

要するにコンパクト群の場合、有限次元表現に落とし込めるととても扱いやすい。

では、 $L^2\left(S^3,d\Omega_3\right)$ のような無限次元表現についてなにか言えるか?

コンパクト等質空間と球表現

KをGのその閉部分群とする。

等質空間G/Kはこのときコンパクトハウスドルフとなる。

定義

Gの既約表現 (ρ, V) がKに関して球表現(Class-1表現)

 $m_{\rho} := \dim V_K$ を ρ の重複度という。

 $\mathcal{D}(G,K)$: 球表現の同値類(表現同型に関して)全体

コンパクト等質空間上のPeter-Weylの定理

<u>定理</u>

 $L^{2}(G/K, d\Omega) = \bigoplus_{\rho \in \mathcal{D}(G,K)} m_{\rho} o_{\rho}(G/K)$

ただし直和記号はHilbert空間としての直和を表す。 すなわち、各空間は互いに直交する。

 m_{ρ} の数だけ重複して同型な既約表現が出てくることを表す。 同型ではあるが異なる(直交する)空間である。

C(G/K) G/K 上の複素数値連続関数がなす線形空間

 $o_{
ho}(G/K)$ C(G/K) の部分空間であり ρ と同型なある一つの既約表現に対する表現空間

S³上のPeter-Weylの定理

実はGのG/Kにおける球表現の重複度は全て1である。

Peter-Weylの定理により次のように完全直交基底が定まる。

$$L^{2}\left(S^{3} \simeq SO(4)/SO(3), d\Omega_{3}\right) = \bigoplus_{n=0}^{\infty} \mathcal{H}_{n}$$

$$\dim \mathcal{H}_{n} =_{n+3} C_{n} -_{n+1} C_{n-2} = (n+1)^{2}$$

ℋ_n n次の超球面調和関数が張る既約部分空間

nは超球面調和関数を作る調和多項式の次元

Gegenbauer多項式を用いた核Gの多項式展開

Gegenbauer多項式 $C_n^{\alpha}(x)$ を母関数のテーラー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、 $u,u' \in S^3$ に対して、

$$G(u - u') = \frac{1}{2S_3} \sum_{n=0}^{\infty} C_n^1 (u \cdot u')$$

が成立する。 $S_3=2\pi^2$ は超球面面積。

Gegenbauer多項式と再生核

Gegenbauer多項式より定義されるC(u・u')という関数は<u>再生核</u> (Reproducing Kernel) となる。

すなわち、 $Y \in \mathcal{H}_m$ に対して、

$$\delta_{mn}Y(\boldsymbol{u}) = \frac{\dim \mathcal{H}_n}{C_n^1(1)S_3} \int_{S^3} d\Omega (\boldsymbol{u}') Y(\boldsymbol{u}') C_n^1 (\boldsymbol{u} \cdot \boldsymbol{u}')$$

となる。(例えば野村隆昭『球面調和函数と群の表現』にある)

対応するHilbert空間 \mathcal{H}_n 内に限れば、関数(Y)を放り込むと積分作用素の働きにより、再生核(C)が指定する位置(\mathbf{u})における値(Y(\mathbf{u}))が返される。(cf. δ 関数、Rieszの表現定理)別の既約部分空間に対しては再生しないどころかO作用素となる。

積分作用素の固有関数としての超球面調和関数

以下の関係式が成り立つ。

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

したがって $Y \in \mathcal{H}_m$ に対して、

$$\delta_{mn}Y(\boldsymbol{u}) = \frac{n+1}{S_3} \int_{S^3} d\Omega (\boldsymbol{u}') Y(\boldsymbol{u}') C_n^1 (\boldsymbol{u} \cdot \boldsymbol{u}')$$

となる。核G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、

$$Y(u) = 2(m+1) \int_{S^3} d\Omega (u') Y(u') G(u-u')$$

となる。Peter-Weylの定理より固有関数は超球面調和関数に限る。

水素原子のスペクトルと縮重度

以上より

$$\frac{2m_e\kappa}{p_0\hbar} = 2n + 2$$

を得る。 $p_0^2 = -2m_e E < 0$ だったので、

水素様原子の束縛状態エネルギースペクトルは

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

縮重度は

$$\dim \mathcal{H}_n =_{n+3} C_n -_{n+1} C_{n-2} = (n+1)^2$$

となる。縮重度は既約表現の次元である。Peter-Weylの定理の帰結からこれ以上の縮退がないこともわかる。

5 水素原子スペクトルを記述するLie代数と高次元幾何学

このセクションで解説すること

- 1.水素原子の束縛固有状態をボソン表示(Heisenberg 代数)で表す。
- 2.これを用いて全束縛固有状態が同一の既約表現になる Lie代数so(4,2)を構築する。
- 3.このLie代数に関連した高次元幾何学について。

su(2)の表現論

三次元のコンパクトLie代数

$$[L_i, L_j] = i\epsilon_{ijk}L_k$$

Casimir演算子 L^2 とCartan部分代数の元(例えば L_3)の同時固有状態となる様に既約表現の基底を取ることができる。

$$L^{2} | l, k \rangle = l(l+1) | l, k \rangle$$

$$L_{3} | l, k \rangle = k | l, k \rangle$$

$$2l \in \mathbb{Z}_{\geq 0}$$

$$k = -l, -l+1, \dots, l-1, l$$

1 によって既約表現の同値類を区別できる。

水素原子の束縛状態のテンソル積表現

◆休憩前にやったようにsu(2)の同型な既約表現のテンソル 積で束縛状態の波動関数を表せる。

$$\Psi_{\tilde{l},m_a,m_b} = |\tilde{l},m_a\rangle_a \otimes |\tilde{l},m_b\rangle_b$$

$$2l \in \mathbb{Z}_{\geq 0}$$
 $m_a, m_b = -\tilde{l}, -\tilde{l} + 1, \cdots, \tilde{l} + 1, \tilde{l}$

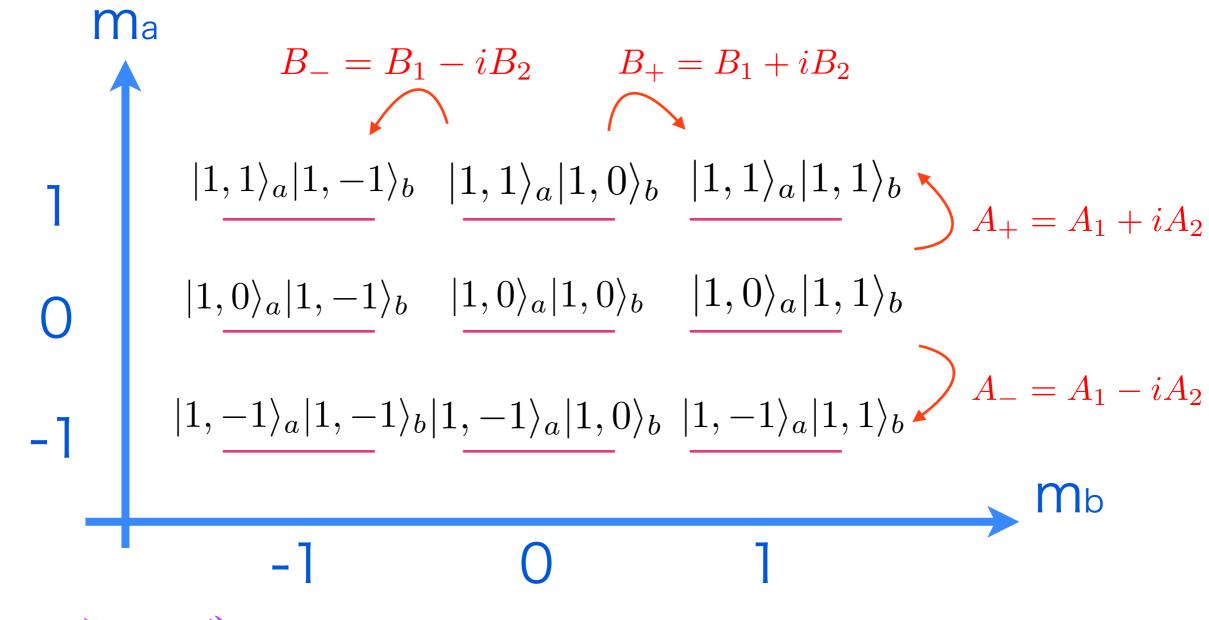
主量子数:
$$N=2\tilde{l}+1$$

エネルギー:
$$E_N = -\frac{1}{2N^2} \frac{m_e}{\hbar^2} \left(\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0}\right)^2$$

縮重度:
$$N^2$$

テンソル積表現の例

$$\tilde{l} = 1 \leftrightarrow n = 3$$
 のときは9状態が縮退する。



エネルギーは

$$E_3 = -\frac{1}{2 \cdot 3^2} \frac{m_e}{\hbar_{44}^2} \left(\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0}\right)^2$$

ボソン演算子とFock空間

ボソン生成演算子 a^{\dagger} とボソン消滅演算子aは交換関係

$$[a, a^{\dagger}] = 1$$
 $[a, a] = [a^{\dagger}, a^{\dagger}] = 0$

を満たす。

 $a|0\rangle = 0$ なる $|0\rangle$ が存在するとして、

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} \left(a^{\dagger} \right)^n |0\rangle$$

によって作られるケットたちが貼る空間がFock空間 この時 $a^{\dagger}a$ は上記の基底の下で対角化されている。

$$a^{\dagger}a | n \rangle = n | n \rangle$$

すなわち $a^{\dagger}a$ は個数演算子としての働きをする。

Jordan-Scwingerのボソン表現

- 一つのスピノール(su(2)のユニタリ表現ベクトル)は
- 二種類のボソン生成演算子で表現可能。

$$|\tilde{l}, k\rangle = \frac{\left(a_1^{\dagger}\right)^{\tilde{l}-k} \left(a_2^{\dagger}\right)^{\tilde{l}+k}}{\sqrt{(\tilde{l}-k)!(\tilde{l}+k)!}} |0,0\rangle \qquad 2\tilde{l} \in \mathbb{Z}_{\geq 0}$$

$$k = -\tilde{l}, -\tilde{l}+1, \dots, \tilde{l}-1, \tilde{l}$$

 a_1

水素原子の束縛状態のボソン表現

◆水素原子の束縛状態は四種類のボソン生成演算子で表現可能

$$|\tilde{l}, m_a\rangle_a \otimes |\tilde{l}, m_b\rangle_b$$

$$=\frac{\left(a_{1}^{\dagger}\right)^{\tilde{l}-m_{a}}\left(a_{2}^{\dagger}\right)^{\tilde{l}+m_{a}}\left(b_{1}^{\dagger}\right)^{\tilde{l}-m_{b}}\left(b_{2}^{\dagger}\right)^{\tilde{l}+m_{b}}}{\sqrt{\left(\tilde{l}-m_{a}\right)!\left(\tilde{l}+m_{a}\right)!\left(\tilde{l}-m_{b}\right)!\left(\tilde{l}+m_{b}\right)!}}\left|0,0\right\rangle_{a}\otimes\left|0,0\right\rangle_{b}$$

alボソン= $\tilde{l}-m_a$ 個 a2ボソン= $\tilde{l}+m_a$ 個

 $b1ボソン=\tilde{l}-m_b$ 個 $b2ボソン=\tilde{l}+m_b$ 個

 $aボソンの合計数=bボソンの合計数= <math>2\tilde{l}$ 個主量子数Nとの関係は $N=2\tilde{l}+1$

角運動量ベクトルやLRLベクトルのボソン表現

角運動量ベクトル
$$L_i = \frac{1}{2}\hat{L}_{jk}\epsilon_{ijk} = \frac{1}{2}\left(A^{\dagger}\tilde{\sigma}_i A + B^{\dagger}\tilde{\sigma}_i B\right)$$

LRLベクトル

$$\tilde{M}_{i} = \hat{L}_{i4} = \frac{1}{2} \left(A^{\dagger} \tilde{\sigma}_{i} A - B^{\dagger} \tilde{\sigma}_{i} B \right)$$

$$\tilde{\sigma}_i = \sigma_2 \sigma_i \sigma_2$$
 $\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$

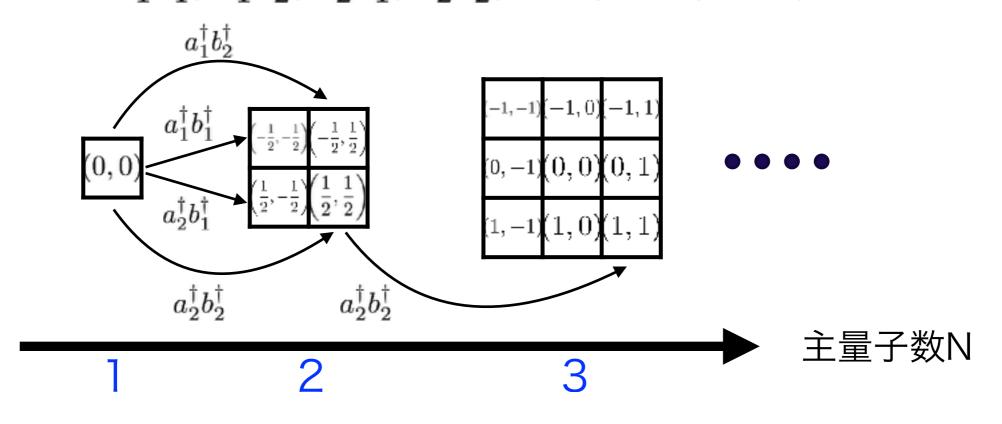
$$A^{\dagger} = \begin{pmatrix} a_1^{\dagger} & a_2^{\dagger} \end{pmatrix}$$
 $A = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix}$ $B^{\dagger} = \begin{pmatrix} b_1^{\dagger} & b_2^{\dagger} \end{pmatrix}$ $B = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix}$

◆束縛固有状態に両ベクトルが作用しても、aボソン、bボソンの数はそれぞれ保存される。(エネルギー・角運動量・LRLベクトル保存則)

スペクトル生成(消滅)演算子

- ◆エネルギーが異なる状態をつなぐ演算子を構成したい。
- ◆考え方:AボソンとBボソンの数が同じ状態の線形結合であることが保たれる演算子である必要がある。
- →2つのボソン演算子の積からなるスペクトル生成(消滅)演 算子の形は以下のもの。

 $a_1^{\dagger}b_1^{\dagger}, a_1^{\dagger}b_2^{\dagger}, a_2^{\dagger}b_1^{\dagger}, a_2^{\dagger}b_2^{\dagger}, a_1b_1, a_1b_2, a_2b_1, a_2b_2$



スペクトル生成(消滅)演算子のエルミート化

8つのスペクトル生成(消滅)演算子

$$a_1^\dagger b_1^\dagger, a_1^\dagger b_2^\dagger, a_2^\dagger b_1^\dagger, a_2^\dagger b_2^\dagger, a_1 b_1, a_1 b_2, a_2 b_1, a_2 b_2$$

これからエルミートな線形独立な演算子は8つ得られる。

$$\hat{L}_{15} = \frac{\mathrm{i}}{2} \left(a_1^{\dagger} b_1^{\dagger} - a_2^{\dagger} b_2^{\dagger} \right) + \text{h.c.} \qquad \hat{L}_{16} = -\frac{1}{2} \left(a_1^{\dagger} b_1^{\dagger} - a_2^{\dagger} b_2^{\dagger} \right) + \text{h.c.}$$

$$\hat{L}_{25} = -\frac{1}{2} \left(a_1^{\dagger} b_1^{\dagger} + a_2^{\dagger} b_2^{\dagger} \right) + \text{h.c.} \qquad \hat{L}_{26} = -\frac{\mathrm{i}}{2} \left(a_1^{\dagger} b_1^{\dagger} + a_2^{\dagger} b_2^{\dagger} \right) + \text{h.c.}$$

$$\hat{L}_{35} = -\frac{\mathrm{i}}{2} \left(a_1^{\dagger} b_2^{\dagger} + a_2^{\dagger} b_1^{\dagger} \right) + \text{h.c.} \qquad \hat{L}_{36} = \frac{1}{2} \left(a_1^{\dagger} b_2^{\dagger} + a_2^{\dagger} b_1^{\dagger} \right) + \text{h.c.}$$

$$\hat{L}_{45} = \frac{1}{2} \left(a_1^{\dagger} b_2^{\dagger} - a_2^{\dagger} b_1^{\dagger} \right) + \text{h.c.} \qquad \hat{L}_{46} = \frac{\mathrm{i}}{2} \left(a_1^{\dagger} b_2^{\dagger} - a_2^{\dagger} b_1^{\dagger} \right) + \text{h.c.}$$

h.c.は第一項に対するエルミート共役を表す。

主量子数演算子

次の演算子を考える。

$$\hat{L}_{56} = \frac{1}{2} \left(A^{\dagger} A + B^{\dagger} B + 2 \right)$$

主量子数Nのエネルギー固有状態

$$|\tilde{l}, m_a\rangle_a \otimes |\tilde{l}, m_b\rangle_b$$
 $N = 2\tilde{l} + 1$

に作用すると

$$\hat{L}_{56} | \tilde{l}, m_a \rangle_a \otimes | \tilde{l}, m_b \rangle_b = N | \tilde{l}, m_a \rangle_a \otimes | \tilde{l}, m_b \rangle_b$$

so(4,2)代数の出現

6つの力学的対称代数Lの基底

8つのスペクトル生成演算子

1つの主量子数演算子



15個の演算子間の交換子は次の様に閉じる。

$$\begin{split} \left[\hat{L}_{\mu\nu},\hat{L}_{\rho\sigma}\right] &= \mathrm{i} \left(\eta_{\mu\rho}\hat{L}_{\nu\sigma} - \eta_{\mu\sigma}\hat{L}_{\nu\rho} - \eta_{\nu\rho}\hat{L}_{\mu\sigma} + \eta_{\nu\sigma}\hat{L}_{\mu\rho}\right) \\ \eta &= \mathrm{diag}(++++--) \end{split}$$

15次元のLie代数=so(4,2)

符号4,2のMinkowski空間 R^{4,2}の回転生成子の代数と同じ。

so(4,2)代数の構造と物理的役割

$$\eta = \text{diag}(++++--)$$

空間(1,2,3,4)回転成分

時間(5,6)回転成分

角運動量演算子

LRLベクトル

エネルギー保存/対称性記述 so(4) 主量子数演算子 エネルギーそのもの so(4)と可換 実はso(4)のCasimir元

時空混合回転成分

スペクトル生成(消滅)演算子 so(4)と非可換

so(4,2)代数と高次元幾何学

リー代数 \$0(4,2) に対応する群はいくつかある。

普遍被覆群(単連結)となるのがSU(2,2)

$$SU(2,2)/Z_2 \simeq SO_0(4,2)$$
 $SO_0(4,2)/Z_2 \simeq C_0(3,1)$

$$SU(2,2) \longrightarrow SO_0(4,2) \longrightarrow C_0(3,1)$$

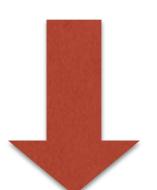


ツイスター空間 あるいは ナルツイスター空間 対応する高次元幾何学



ナルコーン (光錐) あるいは

 $AdS_5 = SO_0(4,2)/SO_O(4,1)$



3,1-Minkowski空間 あるいは コンパクト化 3,1-Minkowski

3,1-Minkowski空間と3,1-共形平坦空間

添字の付け方 1 2 3 0 計量が $\eta = \text{diag}(+++-)$ となる3,1-Minkowski空間 $\mathbb{R}^{3,1}$

このMinkowski空間の計量を

$$g_{\mu\nu}(x) = \eta_{\mu\nu}\omega^2(x)$$

のように変換させた空間たちを考える。

これらの空間たちを3,1-共形平坦空間と呼ぶ。

共形対称性と共形変換群C(3,1)

計量の変換を考える意図

「スケールを変えて見える事象を同一視できるか」

同一視できる≒共形対称性

スケール不変の物理現象、例えば臨界現象の記述に役立つ

共形変換群C(3,1)

共形平坦空間であることを保つような局所微分同相群

共形変換群C(3,1)と共形変換代数

回転演算子

$$L_{\mu\nu} = -i(x_{\mu}\partial_{\nu} - x_{\nu}\partial_{\mu})$$

並進演算子

$$P_{\mu} = -i\partial_{\mu}$$

特殊共形変換演算子

$$K_i = -i \left(2x_{\mu} x^{\nu} \partial_{\nu} - x_{\nu} x^{\nu} \partial_{\mu} \right)$$

スケール(dilation)演算子

$$D = -ix^{\mu}\partial_{\mu}$$

$$\left[L_{\mu\nu}, L_{\rho\sigma}\right] = \mathrm{i}\left(\eta_{\mu\rho}L_{\nu\sigma} - \eta_{\mu\sigma}L_{\nu\rho} - \eta_{\nu\rho}L_{\mu\sigma} + \eta_{\nu\sigma}L_{\mu\rho}\right)$$

$$\left[L_{\mu\nu}, P_{\rho}\right] = \mathrm{i}\left(\eta_{\mu\rho}P_{\nu} - \eta_{\nu\rho}P_{\mu}\right), \ \left[L_{\mu\nu}, K_{\rho}\right] = \mathrm{i}\left(\eta_{\mu\rho}K_{\nu} - \eta_{\nu\rho}K_{\mu}\right)$$

$$\left[P_{\mu},D\right] = -\mathrm{i}P_{\mu},\ \left[K_{\mu},D\right] = \mathrm{i}K_{\mu},\ \left[P_{\mu},K_{\nu}\right] = \mathrm{i}\left(L_{\mu\nu} - 2D\eta_{\mu\nu}\right)$$

$$\left[L_{\mu\nu}, D\right] = \left[P_{\mu}, P_{\nu}\right] = \left[K_{\mu}, K_{\nu}\right] = 0$$

共形変換群C(3,1)と共形変換代数

回転演算子

$$L_{\mu\nu} = -i(x_{\mu}\partial_{\nu} - x_{\nu}\partial_{\mu})$$

並進演算子

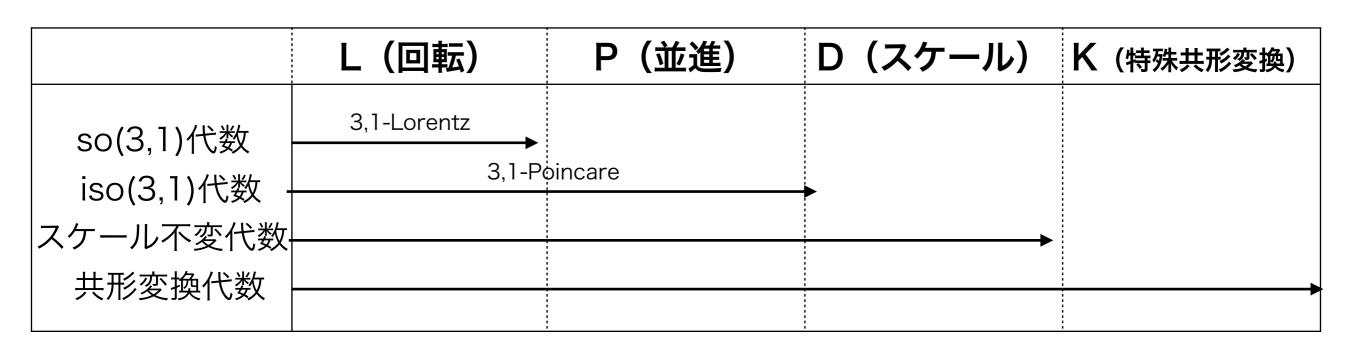
$$P_{\mu} = -i\partial_{\mu}$$

特殊共形変換演算子

$$K_i = -i \left(2x_{\mu} x^{\nu} \partial_{\nu} - x_{\nu} x^{\nu} \partial_{\mu} \right)$$

スケール(dilation)演算子

$$D = -ix^{\mu}\partial_{\mu}$$



共形変換代数がso(4,2)であること

次の式が成立する。

$$\left[\frac{1}{2}\left(K_{\mu}-P_{\mu}\right),\frac{1}{2}\left(K_{\nu}+P_{\nu}\right)\right]=-\frac{1}{4}\left(\left[P_{\mu},K_{\nu}\right]+\left[P_{\nu},K_{\mu}\right]\right)=\mathrm{i}D\eta_{\mu\nu}$$

$$\left[\frac{1}{2}(K_{\mu} - P_{\mu}), D\right] = i\frac{1}{2}(K_{\mu} + P_{\mu}), \quad \left[\frac{1}{2}(K_{\mu} + P_{\mu}), D\right] = i\frac{1}{2}(K_{\mu} - P_{\mu})$$

次の演算子を定義する。

$$L_{-14} = D, L_{\mu 4} = \frac{1}{2} \left(K_{\mu} + P_{\mu} \right), L_{\mu - 1} = \frac{1}{2} \left(K_{\mu} - P_{\mu} \right)$$

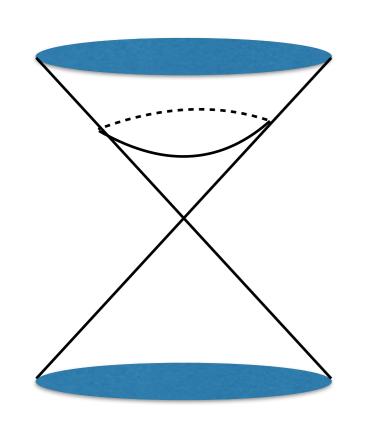
すると、

$$\left[L_{ij}, L_{kl}\right] = \mathrm{i}\left(\eta'_{ik}L_{jl} - \eta'_{il}L_{jk} - \eta'_{jk}L_{il} + \eta'_{jl}L_{ik}\right)$$

添字の付け方 1 2 3 4 0 -1
$$\eta' = \text{diag}(++++--)$$
 so(4,2)になる。

Co(3,1)とSOo(4,2)の関係

ナルコーン \mathcal{K} と切断 M_{γ}



 $\mathbb{R}^{4,2}$ 中のナルコーン (光錐)

$$\mathcal{K} = \{ x \in \mathbb{R}^{4,2} | \langle x, x \rangle = 0 \}$$

でモジュライ空間を考える

ℋ中の原点を通る直線の集合: M

 ${\mathscr X}$ 中の原点を通る半直線の集合: $ilde{M}$

$$M \simeq S^1 \times S^3 / Z_2$$

 $\tilde{M} \simeq S^1 \times S^3$

ナルコーン中の原点を通らない滑らかな切断 M_{γ}

 $ilde{M} \stackrel{.}{\sim} M_{\gamma}$ (完全 or ほぼ)

 M_{γ} はこのとき3,1-共系平坦空間(あるいはそのコンパクト版)となる! $SO_0(4,2)$ の作用(ナルコーン上の回転)で共形平坦空間たちが移り変わりあう。特にgと-gは同じ作用をするので $SO_0(4,2)/Z_2 \simeq C_0(3,1)$

ツイスター空間とSU(2,2)

ツイスター空間 $\mathbb{C}^{2,2}$

計量

$$\eta = \text{diag}(++--)$$

エルミート不定値内積

$$\langle \boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \rangle = x_1 y_1^* + x_2 y_2^* - x_3 y_3^* - x_4 y_4^*$$

が定義された複素四元ベクトル(不定値内積)空間

SU(2,2)はエルミート内積を保ち、 det=1の複素行列がなす群

$$SU(2,2) = \left\{ g \in GL(4, \mathbb{C}) \mid \det(g) = 1, \forall x, y \in \mathbb{C}^{2,2} : \langle gx, gy \rangle = \langle x, y \rangle \right\}$$

ツイスター空間上の外積代数

ツイスター空間上で外積代数を導入する。

例えば
$$\sum_{i < j} u_{ij} e_i \wedge e_j \in \bigwedge^2 \mathbb{C}^{2,2}$$

i<j Hodgeスターは次のような演算

$$*: \bigwedge^k \mathbb{C}^{2,2} \to \bigwedge^{4-k} \mathbb{C}^{2,2}$$

ただし
$$x \wedge *y = \langle x, y \rangle e_1 \wedge e_2 \wedge e_3 \wedge e_4$$

2重ベクトルの場合に次のようにエルミート内積を導入する。

$$\langle e_i \wedge e_j, e_k \wedge e_l \rangle = -\det \begin{pmatrix} \langle e_i, e_k \rangle & \langle e_i, e_l \rangle \\ \langle e_j, e_k \rangle & \langle e_j, e_l \rangle \end{pmatrix}$$

ツイスター空間→C4,2

一般に2重ベクトル同士のエルミート内積は

$$\left\langle \sum_{i < j} u_{ij} e_i \wedge e_j, \sum_{k < l} v_{kl} e_k \wedge e_l \right\rangle = -u_{12} v_{12}^* - u_{34} v_{34}^* + u_{13} v_{13}^* + u_{14} v_{14}^* + u_{23} v_{23}^* + u_{24} v_{24}^*$$

したがって、内積空間として次の同型が成立。

$$\bigwedge^2 \mathbb{C}^{2,2} \simeq \mathbb{C}^{4,2}$$

ツイスター空間→R4,2

さらに次のような空間を定義する。

$$\left(\bigwedge^2 \mathbb{C}^{2,2}\right)_{\mathbb{R}} = \{ v \in \bigwedge^2 \mathbb{C}^{2,2} \mid v = v \}$$

すなわち

$$v_{12} = v_{34}^*, \ v_{24} = v_{24}^*, \ v_{23} = -v_{14}^*$$

これについては実内積空間となる。

$$\left\langle \sum_{i < j} u_{ij} e_i \wedge e_j, \sum_{k < l} v_{kl} e_k \wedge e_l \right\rangle = -u_{12} v_{12}^* + u_{13} v_{13}^* + u_{14} v_{14}^* + \text{c.c.}$$

$$= 2 \left(-\text{Re}(v_{12})^2 - \text{Im}(v_{12})^2 + \text{Re}(v_{13})^2 + \text{Im}(v_{13})^2 + \text{Re}(v_{14})^2 + \text{Im}(v_{14})^2 \right)$$

したがって、4,2-Minkowski空間と同じ計量!

R^{4,2}に対するSU(2,2)の作用

$$\forall g \in SU(2,2) : g(e_i \land e_j) := (ge_i) \land (ge_j)$$

$$\begin{split} \left\langle g(e_i \wedge e_j), g(e_k \wedge e_l) \right\rangle &= -\det \begin{pmatrix} \langle ge_i, ge_k \rangle & \langle ge_i, ge_l \rangle \\ \langle ge_j, ge_k \rangle & \langle ge_j, ge_l \rangle \end{pmatrix} \\ &= -\det \begin{pmatrix} \langle e_i, e_k \rangle & \langle e_i, e_l \rangle \\ \langle e_j, e_k \rangle & \langle e_j, e_l \rangle \end{pmatrix} \\ &= \langle e_i \wedge e_j, e_k \wedge e_l \rangle \end{split}$$

SU(2,2)の作用で内積が保たれる! すなわち、 $SO_0(4,2)$ への群準同型が作れた

g,-g が同じ働きをすることから

$$SU(2,2)/Z_2 \simeq SO_0(4,2)$$

二つの空間と水素原子の関係

①共形平坦空間

今回は束縛状態のみを考えたが、散乱状態・エネルギーゼロ状態を統一的に解釈する幾何学的描像を考える時に有効となる。

- →Conformal Regularization
- ②ツイスター空間

今回紹介していないが、3次元の水素原子の問題は Kustaanheimo-Stiefel変換によって4次元の調和振動子の問題に置き換えられることが知られている。この現象を解釈する際に有効となる。

→Spinorial Regularization

Bars © 2T-physics

背後に2つの時間軸がある理論は幾つかある。

水素原子もそういったものの一つと見ることができる。

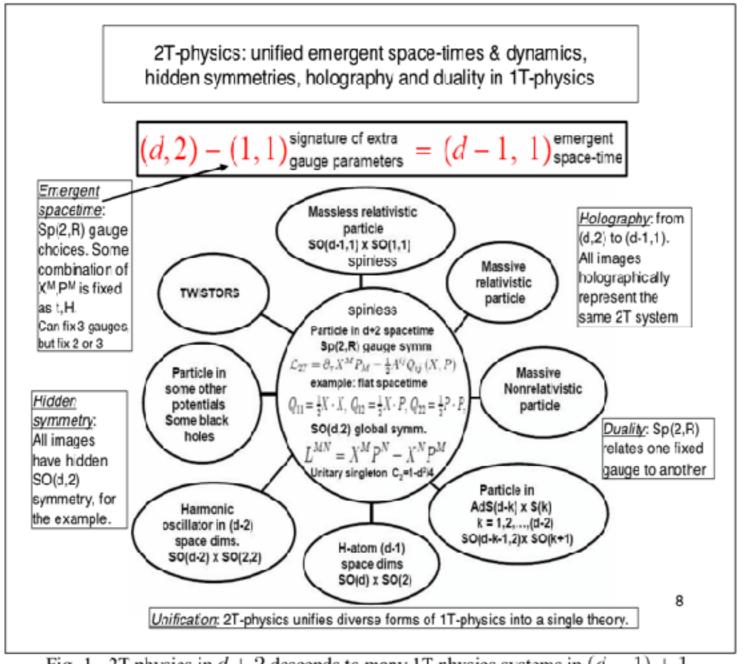


Fig. 1 - 2T-physics in d+2 descends to many 1T-physics systems in (d-1)+1.

Itzhak Bars: "Lectures on Tw9stors" hep-th/0601091

6 水素原子の数理の展望

現在興味を持っていることについて書きます。

水素原子の研究の意義

- ❤理論誕生・検証の舞台
 - ★ 量子力学の誕生、量子電磁力学の誕生
- ❖測定技術の精密化の舞台
 - ★ スペクトルの測定、各種物理定数の決定

❖数理物理進化の舞台

- ★ 数理物理概念(物理の見方)の創出、他の物理系への応用
- ★ 数学へのフィードバック、計算手法の整備

他の物理系への応用

水素原子は三次元の物体でありながら高次元の世界を 見せてくれた。



高次元の対称性が最近になって物性物理・分子科学 の文脈でも追究される様になった。

他の物理系への応用

academist Journal

すべての人に、学問のよろこびを - 最先端研究を伝える学術系メディア

研究コラム インタビュー 研

https://academist-cf.com/journal/?p=8933

原子の対称性を超えるナノ物質を発見!? - 理論化 学の最前線

▲ 春田直般 ○ 2018年10月29日 ■ 研究コラム ● 化学,数学,材料,物理学,物質,計算科学

縮退度の限界を超える

なった。

最近、我々はコンピューターシミュレーションによって、マグネシウム、亜鉛、カドミウムな どからなる微小な四面体型クラスターが、6重縮退や10重縮退といった「超縮退」を実現するこ とを明らかにしました。この縮退度は、分子の限界とされる5重縮退だけでなく、球対称の原子 すら超えるものです。四面体の幾何学的対称性では本来、3重縮退までしか起こらないはずで



り低いため、原子ほどはエネルギーが重ならない。発見された四面体型クラスター

は、特異的な対移性を持つことにより、球対称以上の重なりを示すことが明らかと

関連論文

Haruta, Naoki, et al. "Nanomaterials design for super-degenerate electronic state beyond the limit of geometrical symmetry." Nature communications 9.1 (2018): 3758.

他の物理系への応用(2)

Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical

Supersymmetric Runge-Lenz-Pauli vector for Dirac vortex in topological insulators and graphene

Chi-Ken Lu and Igor F Herbut

Published 20 June 2011 • 2011 IOP Publishing Ltd

Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical, Volume 44, Number 29

+ Article information

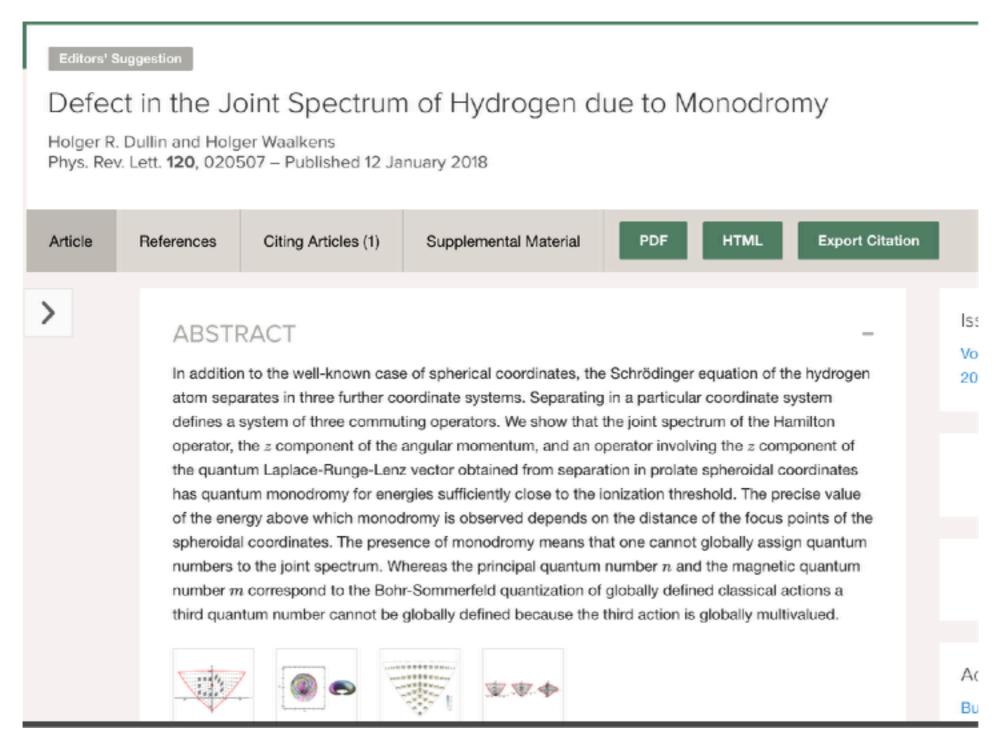
Abstract

The Dirac mass-vortex at the surface of a topological insulator or in graphene is considered. Within the linear approximation for the vortex amplitude's radial dependence, the spectrum is a series of degenerate bound states, which can be classified by a set of accidental SU(2) and supersymmetry generators (Herbut and Lu 2011 *Phys. Rev.* B 83 125412). Here we discuss further the properties and manifestations of the supersymmetry of the vortex Hamiltonian, and point out some interesting analogies with the Runge–Lenz–Pauli vector in the non-relativistic hydrogen atom. Symmetry-breaking effects due to a finite chemical potential and the Zeeman field are also analyzed. We find that a residual accidental degeneracy remains only in the special case of equal magnitudes of both terms; otherwise it is removed entirely.

トポロジカル絶縁体-超伝導体接合系→水素原子の対称性

Lu, Chi-Ken, and Igor F. Herbut. "Supersymmetric Runge-Lenz-Pauli vector for Dirac vortex in topological insulators and graphene." Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical 44.29 (2011): 295003.

新しい数理物理概念



量子数の組みを格子点と見たときに生じる欠陥のモノドロミーによる解析、変数分離座標系との関係について

数学へのフィードバック

水素原子に潜む高度な対称性



様々な座標系で変数分離が可能となる。 水素原子では位置座標表示では4種類、運動量座標 表示(Fockの解法によりS³の問題にした時)では6 種類、それぞれに応じて特殊関数が出現



異なる特殊関数間を結びつける公式が豊富に得られる。それらの関係性は物理的に解釈できる可能性がある。

数学へのフィードバック

例えばある座標系ではgeneralized Lame微分方程式

$$\left[\frac{d^2}{d\rho_j^2} + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{n+1} \frac{1}{\rho_j - e_i} \frac{d}{d\rho_j} - \frac{\sum_{i=1}^n \beta_{i-1} \rho_j^{n-i}}{4 \prod_{i=1}^{n+1} (\rho_j - e_i)} \right] X_j(\rho_j) = 0$$

が出てくる。このタイプの微分方程式はさらに一般的化したものとしてはHeine-Stieltjes微分方程式と呼ばれる。この形の微分方程式は確定特異点が一般には超幾何微分方程式よりも多く、理解が進んでいない部分が多い。

ありがとうございました!