水素原子の束縛状態における表現論

de Sitter 群 $SO(4,1)$ と共形変換群 $SO(4,2)$

adhara

2017 年 9 月 18 日

目次

1　準備

1.1　リー代数 su(2) の既約ユニタリ表現と Jordan-Schwinger の Boson 化

su(2) の既約ユニタリ表現を Jordan-Schwinger の Boson 化にしたがって二つの独立な Boson 演算子を用いて表す。すなわち、$i, j = 1, 2$ として

$$\left[a_i, a_j^\dagger\right] = \delta_{ij} \tag{1}$$

$$[a_i, a_j] = \left[a_i^\dagger, a_j^\dagger\right] = 0 \tag{2}$$

が成立するものとして、ベクトル

$$|l, k\rangle = \frac{(a_1^\dagger)^{l-k}(a_2^\dagger)^{l+k}}{\sqrt{(l-k)!(l+k)!}}|0, 0\rangle \tag{3}$$

を定義する。ここで l は最高ウェイトを表し、これが同じベクトルは同じ su(2) の既約表現に属することになる。

リー代数 su(2) の基底を H_1, H_2, H_3 とし交換関係は

$$[H_i, H_j] = \mathrm{i}\epsilon_{ijk}H_k \tag{4}$$

のようになっているものとする。さらに、

$$H_\pm = H_1 \pm \mathrm{i}H_2 \tag{5}$$

という昇降演算子を用意する。

リー代数 $su(2)$ の各演算子は

$$H_3|l,k\rangle = k|l,k\rangle \tag{6}$$
$$H_+|l,k\rangle = -\sqrt{(l-k)(l+k+1)}|l,k+1\rangle \tag{7}$$
$$H_-|l,k\rangle = -\sqrt{(l+k)(l-k+1)}|l,k-1\rangle \tag{8}$$

のように作用する。したがって

$$H_3 = \frac{1}{2}\left(a_2^\dagger a_2 - a_1^\dagger a_1\right) \tag{9}$$
$$H_+ = -a_2^\dagger a_1 \tag{10}$$
$$H_- = -a_1^\dagger a_2 \tag{11}$$

となることがわかる。

ボソン演算子行列

$$A = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} \tag{12}$$
$$A^\dagger = \begin{pmatrix} a_1^\dagger & a_2^\dagger \end{pmatrix} \tag{13}$$

とパウリ行列

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \tag{14}$$

$$\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \tag{15}$$

$$\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{16}$$

を導入すると

$$H_3 = \frac{1}{2} A^\dagger \sigma_z A \tag{17}$$

$$H_+ = -\frac{1}{2} A^\dagger (\sigma_x - i\sigma_y) A \tag{18}$$

$$H_- = -\frac{1}{2} A^\dagger (\sigma_x + i\sigma_y) A \tag{19}$$

と書ける。

さらに $\tilde{A} = \sigma_y A$ と $\sigma_y^\dagger = \sigma_y, \sigma_y \sigma_x \sigma_y = -\sigma_x, \sigma_y \sigma_z \sigma_y = -\sigma_z$ を用いると、

$$H_3 = \frac{1}{2} \tilde{A}^\dagger \sigma_z \tilde{A} \tag{20}$$

$$H_+ = \frac{1}{2} \tilde{A}^\dagger (\sigma_x + i\sigma_y) \tilde{A} \tag{21}$$

$$H_- = \frac{1}{2} \tilde{A}^\dagger (\sigma_x - i\sigma_y) \tilde{A} \tag{22}$$

と書け、

$$H_1 = \frac{1}{2} \tilde{A}^\dagger \sigma_x \tilde{A} \tag{23}$$

$$H_2 = \frac{1}{2} \tilde{A}^\dagger \sigma_y \tilde{A} \tag{24}$$

$$\tag{25}$$

となる。

$$a_1|l,k\rangle = \sqrt{l-k}\left|l-\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}\right\rangle \tag{26}$$

$$a_2|l,k\rangle = \sqrt{l+k}\left|l-\frac{1}{2},k-\frac{1}{2}\right\rangle \tag{27}$$

$$a_1^\dagger|l,k\rangle = \sqrt{l-k+1}\left|l+\frac{1}{2},k-\frac{1}{2}\right\rangle \tag{28}$$

$$a_2^\dagger|l,k\rangle = \sqrt{l+k+1}\left|l+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}\right\rangle \tag{29}$$

1.2 水素原子の束縛状態の Jordan-Schwinger の Boson 表示

水素原子のハミルトニアンを

$$H = -\frac{\nabla^2}{2m_e} - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m_e} - \frac{\kappa}{r} \tag{30}$$

に対して Schrödinger 方程式

$$H\Psi = E\Psi \tag{31}$$

の全束縛状態のなすヒルベルト空間 $\mathcal{H}_b$ について考えている（束縛状態は $E<0$ となるエネルギー固有状態)。

水素原子の束縛状態波動関数は四種類のボソン生成演算子を用いることで表現できる。すなわち l を非負の整数あるい

は半整数として、

$$\Psi_{l,m_x} \otimes \Psi_{l,m_y} = \frac{(a_1^\dagger)^{l-m_x}(a_2^\dagger)^{l+m_x}(b_1^\dagger)^{l-m_y}(b_2^\dagger)^{l+m_y}}{\sqrt{(l-m_x)!(l+m_x)!(l-m_y)!(l+m_y)!}}\Psi_0 \tag{32}$$

によってエネルギーが

$$E = -\frac{1}{2(2l+1)^2}m_e\kappa^2 \tag{33}$$

となりかつ正規直交化された束縛状態を表示できる。（ただし、$m_x, m_y = -l, -l+1, \cdots l-1, l$）すなわち、$\mathcal{H}_b$ の完全正規直交基底となる。

1.3　シュレディンガー方程式の放物線座標表示

放物線座標は三次元空間中の曲線直交座標の一種である。

$$\begin{aligned} x_1 &= (\lambda_1\lambda_2)^{\frac{1}{2}}\cos\phi \\ x_2 &= (\lambda_1\lambda_2)^{\frac{1}{2}}\sin\phi \\ x_3 &= \frac{\lambda_1-\lambda_2}{2} \end{aligned} \tag{34}$$

のようにデカルト座標表示 (x_1, x_2, x_3) から、放物線座標表示 $(\lambda_1, \lambda_2, \phi)$ に移ることが出来る。このとき、

$$\begin{aligned} \tan\phi &= \frac{x_2}{x_1} \\ \frac{\lambda_1+\lambda_2}{2} &= r = \sqrt{x^2+y^2+z^2} \\ \lambda_1 &= x_3 + r \\ \lambda_2 &= -x_3 + r \end{aligned} \tag{35}$$

のようになっている。

$$\alpha = \frac{1}{N}\frac{m_e\kappa}{\hbar^2} \tag{36}$$

となる。（以下、α_N と書く。）エネルギーは N に依存し、

$$E_N = -\frac{\hbar^2}{2m_e}\alpha_N^2 = -\frac{m_e}{2\hbar^2}\frac{\kappa^2}{N^2} \tag{37}$$

となる。

■波動関数

波動関数の関数形は、

$$\Psi \propto e^{im\phi}e^{-\frac{\alpha_N}{2}(\lambda_1+\lambda_2)}(\lambda_1\lambda_2)^{\frac{|m|}{2}}L_{N_1}^{|m|}(\alpha_N\lambda_1)L_{N_2}^{|m|}(\alpha_N\lambda_2) \tag{38}$$

のようになる。ただし、$N_2 = N - N_1 - |m| - 1$ となっているので、独立な量子数は N, N_1, m である。

$$|l, m_a\rangle \otimes |l, m_b\rangle = \Psi_{2l+1, l-\frac{|m_a+m_b|+(m_a-m_b)}{2}, m_a+m_b} \tag{39}$$