非相対論的水素原子のスペクトル生成代数 $\mathfrak{su}(1,1)$

adhara*

2025 年 9 月 10 日

目次

* Twitter @adhara_mathphys

1 序論

非相対論的水素原子に対する Schrödinger 方程式にはエネルギーの符号が異なる三種類の固有状態[*1]がある：

1. エネルギー負の束縛状態：離散的なスペクトルを形成する．古典的には楕円軌道に対応する．
2. エネルギー正の散乱状態：連続的なスペクトルを形成する．古典的には双曲軌道に対応する．
3. エネルギーゼロの状態： 束縛状態と散乱状態の狭間にある．古典的には放物軌道に対応する．

これら三種類の状態は数学的にはかなり異なった性質を持つが，一方で共通の数理構造を持つ．本ノートで紹介する水素原子のスペクトル生成代数 $\mathfrak{su}(1,1)$[1, 2] は，三種類の状態に共通な数理構造の一つである．

2 問題設定と準備

2.1 問題設定

非相対論的水素様原子に対する Schrödinger 方程式を考える：

$$\begin{aligned} H\Psi(\boldsymbol{r}) &= \left[-\frac{\hbar^2}{2m_e}\nabla^2 - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}\right]\Psi(\boldsymbol{r}) \\ &= \left[-\frac{\hbar^2}{2m_e}\nabla^2 - \frac{\kappa}{r}\right]\Psi(\boldsymbol{r}) \\ &= E\Psi(\boldsymbol{r}) \end{aligned} \tag{1}$$

ここで，Z は原子の価数である．また，m_e は正確には電子そのものの質量というよりは換算質量であるべきである．

2.2 球極座標表示による変数分離解法

中心力ポテンシャルの問題は球極座標表示で変数分離することで解くことができる．中心力下ポテンシャルでは，角運動量演算子 $\boldsymbol{L} = \boldsymbol{r} \times (-i\hbar\nabla_{\boldsymbol{r}})$ に対して，$\boldsymbol{L}^2$ が H と可換であり，H と $\boldsymbol{L}$ の同時固有状態を考えることができる．角運動量演算子を用いるとシュレディンガー方程式は

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{d}{dr} - \frac{\boldsymbol{L}^2}{\hbar^2 r^2} + \frac{2\kappa}{r}\frac{m_e}{\hbar^2} + 2E\frac{m_e}{\hbar^2}\right]\Psi(\boldsymbol{r}) = 0 \tag{2}$$

のように書き換えられる．

[*1] 連続的なスペクトルの場合には一般化固有状態とするのが正しい．正確性を欠くが，本ノートでは両者を区別せずに固有状態と称する

球極座標表示の変数分離では，角度部分と動径部分を変数分離した解を探す．すなわち角度部分として球面調和関数を用い，

$$\Psi(\boldsymbol{r}) = Y_{lm}(\theta,\phi)R_l(r)$$

の形の解を探す．整数 l, m はそれぞれ角運動量量子数，磁気量子数と呼ばれ，$l \geq 0, -l \leq m \leq l$ である．ここで $Y_{lm}(\theta,\phi)$ は L^2, L_z の同時固有状態であり，

$$\begin{aligned}\boldsymbol{L}^2 Y_{lm}(\theta,\phi) &= l(l+1)\hbar^2 Y_{lm}(\theta,\phi)\\ \boldsymbol{L}_z Y_{lm}(\theta,\phi) &= m\hbar Y_{lm}(\theta,\phi)\end{aligned}$$

である．さらに規格化条件

$$\int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\pi} \sin\theta d\theta \, |Y_{lm}(\theta,\phi)|^2 = 1$$

が成立している．

動径部分は固有値方程式

$$\left[r\frac{d^2}{dr^2} + 2\frac{d}{dr} - \frac{l(l+1)}{r} + 2\kappa\frac{m_e}{\hbar^2} + 2E\frac{m_e}{\hbar^2}r\right]R_l(r) = 0 \tag{3}$$

に帰着する．今回の主役はこの動径部分の固有値方程式である．

2.3 動径部分の固有値方程式の書き換え

エネルギーの符号ごとに固有値方程式を書き換える．

■$E < 0$ のとき　$\beta_- > 0$ を

$$\beta_-^2 = -\frac{\kappa^2}{2E}\frac{m_e}{\hbar^2}$$

を満たす数，$\alpha_- > 0$ を

$$\alpha_-^2 = -2E\frac{m_e}{\hbar^2} = \left(\frac{m_e\kappa}{\beta_-\hbar^2}\right)^2$$

を満たす数とすると，式 3 は，

$$\frac{1}{2}\left[-r\frac{d^2}{dr^2} - 2\frac{d}{dr} + \frac{l(l+1)}{r} + \alpha_-^2 r\right]R_l(r) = \alpha_-\beta_- R_l(r)$$

となる．

さらに変数変換

$$t = \alpha_- r$$

を行うと，

$$\frac{1}{2}\left[-t\frac{d^2}{dt^2}-2\frac{d}{dt}+\frac{l(l+1)}{t}+t\right]R_l(t/\alpha_-)=\beta_- R_l(t/\alpha_-)$$

と変換できる．

　ここで

$$\psi_l(t)=t^{\frac{1}{2}}R_l(t/\alpha_-)$$

とすると，

$$\frac{1}{2}\left[-t\frac{d^2}{dt^2}-\frac{d}{dt}+\frac{\left(l+\frac{1}{2}\right)^2}{t}+t\right]\psi_l(t)=\beta_-\psi_l(t) \tag{4}$$

となる．

■$E>0$ のとき　$\beta>0$ を

$$\beta_+^2=\frac{\kappa^2}{2E}\frac{m_e}{\hbar^2}(>0)$$

を満たす数，$\alpha>0$ を

$$\alpha_+^2=2E\frac{m_e}{\hbar^2}=\left(\frac{m_e\kappa}{\beta_+\hbar^2}\right)^2$$

を満たす数とすると，式 3 は，

$$\frac{1}{2}\left[-r\frac{d^2}{dr^2}-2\frac{d}{dr}+\frac{l(l+1)}{r}-\alpha_+^2 r\right]R_l(r)=\alpha_+\beta_+R_l(r)$$

となる．

　さらに変数変換

$$t=\alpha_+ r$$

を行うと，

$$\frac{1}{2}\left[-t\frac{d^2}{dt^2}-2\frac{d}{dt}+\frac{l(l+1)}{t}-t\right]R_l(t/\alpha_+)=\beta_+ R_l(t/\alpha_+)$$

と変換できる．

　ここで

$$\psi_l(t)=t^{\frac{1}{2}}R_l(t/\alpha_+)$$

とすると，

$$\frac{1}{2}\left[-t\frac{d^2}{dt^2}-\frac{d}{dt}+\frac{\left(l+\frac{1}{2}\right)^2}{t}-t\right]\psi_l(t)=\beta_+\psi_l(t) \tag{5}$$

となる．

■$E=0$ のとき　$\beta_0 = 2\kappa \frac{m_e}{\hbar^2}$, $t=\beta_0 r$ として，

$$\left[-t\frac{d^2}{dt^2} - 2\frac{d}{dt} + \frac{l(l+1)}{t}\right] R_l(t/\beta_0) = R_l(t/\beta_0)$$

となる．

　ここで

$$\psi_l(t) = t^{\frac{1}{2}} R_l(t/\beta_0)$$

とすると，

$$\left[-t\frac{d^2}{dt^2} - \frac{d}{dt} + \frac{\left(l+\frac{1}{2}\right)^2}{t}\right] \psi_l(t) = \psi_l(t) \tag{6}$$

となる．

3　動径部分の固有値方程式に内在するスペクトル生成代数 $\mathfrak{su}(1,1)$

3.1　Lie 代数 $\mathfrak{su}(1,1)$

　Lie 代数 $\mathfrak{su}(1,1)$ は以下のように定義される：

$$\mathfrak{su}(1,1) := \left\{ X \in M_2(\mathbb{C}) \;\middle|\; X^\dagger \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} X = 0,\ \mathrm{tr}(X) = 0 \right\}. \tag{7}$$

似た Lie 代数として $\mathfrak{su}(2)$ があるが，こちらの定義は

$$\mathfrak{su}(2) := \left\{ X \in M_2(\mathbb{C}) \;\middle|\; X^\dagger + X = 0,\ \mathrm{tr}(X) = 0 \right\} \tag{8}$$

である．$\mathfrak{su}(2)$ と $\mathfrak{su}(1,1)$ は次元が共に 3 となる Lie 代数だが，性質は大きく異なる．すなわち，$\mathfrak{su}(2)$ から生成される Lie 群 $SU(2)$ はコンパクトであるのに対して，$\mathfrak{su}(1,1)$ から生成される Lie 群 $SU(1,1)$ [*2] はノンコンパクトとなる．それに伴い，非自明な既約ユニタリ表現空間の次元は $\mathfrak{su}(1,1)$ では無限次元となる．

　$\mathfrak{su}(1,1)$ の基底 $\{J_0, J_1, J_2\}$ は，以下の交換関係を満たすように取ることができる．

$$[J_1, J_2] = J_0,\ [J_0, J_1] = -J_2,\ [J_2, J_0] = -J_1. \tag{9}$$

第一式の右辺の符号が $-$ になった場合は $\mathfrak{su}(2)$ の基底間の交換関係に相当する．

[*2] $SU(1,1)$ は以下のように定義される：

$$\begin{aligned} SU(1,1) &:= \left\{ g \in GL(2,\mathbb{C}) \;\middle|\; g^\dagger \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} g = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix},\ \det g = 1 \right\} \\ &= \left\{ \begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ \beta^* & \alpha^* \end{pmatrix} \;\middle|\; \alpha, \beta \in \mathbb{C}, |\alpha|^2 - |\beta|^2 = 1 \right\}. \end{aligned}$$

$\mathfrak{su}(2)$ と同様に，昇降演算子を

$$J_\pm = J_1 \pm \mathrm{i} J_2 \tag{10}$$

のように定義すると，

$$[J_0, J_\pm] = \pm \mathrm{i} J_\pm, \quad [J_+, J_-] = -2\mathrm{i} J_0 \tag{11}$$

が成立する．さらに，$\mathfrak{su}(1,1)$ の全ての元と可換となる Casimir 演算子 C が存在し，

$$C = -J_0^2 + J_1^2 + J_2^2 = -J_0^2 + \frac{1}{2}(J_+ J_- + J_- J_+) \tag{12}$$

と表される．

3.2 Cartan–Killing 形式を用いた $\mathfrak{su}(1,1)$ の元の分類

本節では，Cartann-Killing を用いて $\mathfrak{su}(1,1)$ の元を分類する．Cartan–Killing 形式は

$$B(x, y) := \mathrm{tr}(\mathrm{ad}(x)\,\mathrm{ad}(y)) \tag{13}$$

で定義される双線型対称形式である．ここで ad は Lie 代数の随伴表現で，

$$\mathrm{ad} : \mathfrak{g} \to \mathfrak{gl}(\mathfrak{g}), \quad x \mapsto [x, \cdot] \tag{14}$$

で与えられる．

J_0, J_1, J_2 に対する随伴表現は

$$\mathrm{ad}(J_0) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}, \qquad \mathrm{ad}(J_1) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \qquad \mathrm{ad}(J_2) = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \tag{15}$$

となり，定義に従って計算すると，

$$B(J_0, J_0) = -2, \tag{16}$$

$$B(J_1, J_1) = 2, \tag{17}$$

$$B(J_2, J_2) = 2, \tag{18}$$

となる．よって，一般の $\mathfrak{su}(1,1)$ の元

$$X = aJ_0 + bJ_1 + cJ_2 \ (a, b, c \in \mathbb{R})$$

に対しては，

$$\begin{aligned} B(X, X) &= B(aJ_0 + bJ_1 + cJ_2, aJ_0 + bJ_1 + cJ_2) \\ &= a^2 B(J_0, J_0) + b^2 B(J_1, J_1) + c^2 B(J_2, J_2) \\ &= 2(-a^2 + b^2 + c^2), \end{aligned} \tag{19}$$

となる．

この値の符号によって元の分類を行う[*3]：

[*3] 元々は対応する Lie 群 $SU(1,1)$ やそれと同型な $SL(2, \mathbb{R})$ の元の性質に基づく分類である．

1. $B(X,X)<0$（すなわち $a^2>b^2+c^2$）のとき楕円的，
2. $B(X,X)=0$（すなわち $a^2=b^2+c^2$）のとき放物的，
3. $B(X,X)>0$（すなわち $a^2<b^2+c^2$）のとき双曲的．

$B(X,X)<0$ となる元は $\{e^{\theta X}\mid\theta\in\mathbb{R}\}$ がコンパクト群となる「コンパク $B(X,X)\geq 0$ となる元は $\{e^{\theta X}\mid\theta\in\mathbb{R}\}$ がノンコンパクト群となる「ノンコンパクト元」である．

3.3　分類の意味

■Lie 群の Lie 代数上への随伴表現　G を Lie 群，$\mathfrak{g}$ をそれに付随する Lie 代数（G の単位元における接空間）とする．各 $g\in G$ に対して，

$$\phi_g : G\to G,\ \phi_g : h\mapsto ghg^{-1} \tag{20}$$

という写像を考えることができ，これは G の内部自己同型写像と呼ばれる．この写像単位元 $e\in G$ における微分は

$$d\phi_g|_e : \mathfrak{g}\to\mathfrak{g} \tag{21}$$

のように Lie 代数の同型写像となる．これは $\mathfrak{g}$ 上の線形同型でもある．そこで準同型を

$$\mathrm{Ad} : G\to GL(\mathfrak{g}),\quad g\mapsto d\phi_g|_e \tag{22}$$

と定めると，これは Lie 群 G の Lie 代数 $\mathfrak{g}$ への随伴表現と呼ばれる．

■$\mathfrak{su}(1,1)$ の元の分類の意味　特に $G=SU(1,1)$，$\mathfrak{g}=\mathfrak{su}(1,1)$ の場合，随伴表現の核が $\{\pm I\}$ であることから，像は

$$\mathrm{Ad}(SU(1,1))\cong SU(1,1)/\{\pm I\}\cong SO^+(2,1) \tag{23}$$

となる[*4]．つまり，各 $g\in SU(1,1)$ に対して $\mathrm{Ad}(g)$ は $(-,+,+)$ 型の Minkowski 空間に作用していると考えることができる．実は $B(X,X)$ は Minkowski 内積に相当しており，$\mathrm{Ad}(g)$ の作用により不変である．特に $B(X,X)$ の符号は $\mathrm{Ad}(g)$ の作用により不変であり，符号が異なるもの同士が $\mathrm{Ad}(g)$ によって移り変わることはない．

3.4　物理流の表記について

物理では $J_i=\mathrm{i}K_i$ $(i=1,2,3)$ を満たす K_i を考えることが多い．本来 K_i たちは数学で定義される $\mathfrak{su}(1,1)$ の元にはなり得ない．濫用的な表現として，物理では「K_i たちは $\mathfrak{su}(1,1)$ の演算子である」と

[*4] $O(2,1)$ は，3 次元ローレンツ型二次形式（符号型 $(2,1)$）を保存する行列全体の群である：

$$O(2,1)=\{g\in GL(3,\mathbb{R})\mid g^T\eta g=\eta\},\quad \eta=\mathrm{diag}(1,1,-1).$$

この群は 4 つの連結成分に分かれるが，単位行列に連結な成分を $SO^+(2,1)$ と表す．

いった表現をする．本ノートでは K_i たちの実数係数の線形結合でできるものを「$\mathfrak{su}(1,1)$ の演算子」と呼ぶことにする．K_i $(i=1,2,3)$ の間の交換関係は

$$[K_1, K_2] = -\mathrm{i}K_0,\ [K_0, K_1] = \mathrm{i}K_2,\ [K_2, K_0] = \mathrm{i}K_1 \tag{24}$$

となる．

J_i のときと同様に昇降演算子を

$$K_\pm = K_1 \pm \mathrm{i}K_2 \tag{25}$$

のように定義すると，

$$[K_0, K_\pm] = \pm K_\pm, \quad [K_+, K_-] = -2K_0 \tag{26}$$

が成立する．J_i のときに導入された Casimir 演算子 C は

$$C = K_0^2 - K_1^2 - K_2^2 = K_0^2 - \frac{1}{2}(K_+K_- + K_-K_+) \tag{27}$$

と表されるが，これらはやはり K_1, K_2, K_3 と可換となる．

■分類　一般の $\mathfrak{su}(1,1)$ の演算子

$$X = aK_0 + bK_1 + cK_2 \ (a, b, c \in \mathbb{R})$$

に対して，分類は

1. $a^2 > b^2 + c^2$ のとき楕円的，
2. $a^2 = b^2 + c^2$ のとき放物的，
3. $a^2 < b^2 + c^2$ のとき双曲的．

となる．

3.5　動径部分の固有値方程式に内在するスペクトル生成代数 $\mathfrak{su}(1,1)$

以下のように微分演算子を定義すると

$$K_0 = \frac{1}{2}\left[-t\frac{d^2}{dt^2} - \frac{d}{dt} + \frac{\left(l+\frac{1}{2}\right)^2}{t} + t\right] \tag{28}$$

$$K_+ = \frac{1}{2}\left[-t\frac{d^2}{dt^2} - \frac{d}{dt} + \frac{\left(l+\frac{1}{2}\right)^2}{t} - t + 2t\frac{d}{dt} + 1\right] \tag{29}$$

$$K_- = \frac{1}{2}\left[-t\frac{d^2}{dt^2} - \frac{d}{dt} + \frac{\left(l+\frac{1}{2}\right)^2}{t} - t - 2t\frac{d}{dt} - 1\right] \tag{30}$$

式 26 と同じ交換関係が成立する：

$$[K_0, K_\pm] = \pm K_\pm, [K_+, K_-] = -2K_0$$

したがって $K_1 \pm \mathrm{i}K_2 = K_\pm$ を満たすように K_1, K_2 を定義すると，K_0, K_1, K_2 は

$$[K_1, K_2] = -\mathrm{i}K_0 \tag{31}$$
$$[K_0, K_1] = \mathrm{i}K_2 \tag{32}$$
$$[K_2, K_0] = \mathrm{i}K_1 \tag{33}$$

を満たし，$\mathfrak{su}(1,1)$ の演算子であることがわかる．ここで，

$$K_1 = \frac{1}{2}(K_+ + K_-) = \frac{1}{2}\left[-t\frac{d^2}{dt^2} - \frac{d}{dt} + \frac{\left(l+\frac{1}{2}\right)^2}{t} - t\right] \tag{34}$$
$$K_2 = \frac{1}{2\mathrm{i}}(K_+ - K_-) = \frac{1}{2\mathrm{i}}\left[2t\frac{d}{dt} + 1\right] \tag{35}$$

となる．

また Casimir 演算子 C は計算により

$$\begin{aligned} C &= K_0^2 - \frac{1}{2}\left(K_+K_- + K_-K_+\right) \\ &= l(l+1) \end{aligned} \tag{36}$$

となる．

Schrödinger 方程式は $\mathfrak{su}(1,1)$ の演算子を用いて以下のように書くことができる．

■$E > 0$ のとき　楕円型の演算子に対する固有値方程式に帰着する：

$$K_0\psi(t) = \beta_-\psi(t) \tag{37}$$

■$E = 0$ のとき　放物型の演算子に対する固有値方程式に帰着する：

$$(K_0 + K_1)\psi(t) = \psi(t) \tag{38}$$

■$E < 0$ のとき　双曲型の演算子に対する固有値方程式に帰着する：

$$K_1\psi(t) = \beta_+\psi(t) \tag{39}$$

スペクトル生成代数と呼ばれる理由を以下に記す．束縛状態の場合の固有値方程式は

$$K_0\psi(t) = \beta_-\psi(t)$$

と書かれるが，

$$K_0K_+\psi(t) = (K_+K_0 + K_+)\psi(t) = (\beta_- + 1)K_+\psi(t)$$

となることから，$K_+\psi(t)$ はエネルギーが異なる固有状態に相当すると見做せる．エネルギーが異なる固有状態を作り出す機能に着目して $\mathfrak{su}(1,1)$ をスペクトル生成代数と呼ぶ [1, 2]．

4　展望

今回紹介した内容の先には

- 非相対論的水素原子の代数構造の中で $\mathfrak{su}(1,1)$ がどのような位置付けにあるか考える [1, 2].
- 固有値方程式の解を $\mathfrak{su}(1,1)$ の表現論を用いて調べる [3]．
- 経路積分や一般化コヒーレント状態と $\mathfrak{su}(1,1)$ の関係を考える [4].
- 他の変数分離ではどうなっているかを調べる.
- 相対論的に移行するとどうなるかを調べる.
- $\mathfrak{su}(1,1)$ の構造を持つ他の系との関係を調べる.

などがある.

参考文献

[1] A. Bohm, Y. Ne'Eman, & A. O. Barut (1989), "Dynamical Groups and Spectrum Generating Algebras." World Scientific.

[2] C. E. Wulfman (2010),"Dynamical Symmetry." World Scientific.

[3] G. Lindblad, & B. Nagel (1970), "Continuous bases for unitary irreducible representations of $SU(1,1)$." In Annales de l'institut Henri Poincaré. Section A, Physique Théorique (Vol. 13, No. 1, pp. 27-56).

[4] J. R. Klauder (1996), "Coherent states for the hydrogen atom." Journal of Physics A: Mathematical and General 29.12: L293.