

Buckminsterfullerene 様剛体回転子 と非相対論的水素様原子の力学的対称性

adhara*

2023 年 1 月 22 日 🍷

概要

本ノートでは Buckminsterfullerene 様剛体回転子の自由回転運動及び非相対論的水素様原子の Schrödinger 方程式の力学的対称性について議論する。両方の問題において対称性がもたらす縮退数は四次元回転群に付随する Lie 代数 $\mathfrak{so}(4)$ の既約表現の次元に等しい。一方で許される既約表現には差異があるために、実現される縮退数には差異がある。剛体の回転運動の力学的対称性の議論については [3, 4, 5, 6] を参考に行っている。水素原子の力学的対称性の議論については [8, 9] を参考に行っている。

* [Twitter @adhara_mathphys](#)

目次

| | | |
|------|---|----|
| 1 | 対称性という言い回しについて | 3 |
| 2 | Buckminsterfullerene の力学的対称性 | 3 |
| 2.1 | Buckminsterfullerene とその慣性モーメント | 3 |
| 2.2 | 剛体の自由回転運動の古典力学 | 3 |
| 2.3 | 剛体の自由回転運動の量子力学 | 5 |
| 2.4 | Buckminsterfullerene の自由回転運動における $\mathfrak{su}(2)$ 対称性 | 5 |
| 2.5 | Buckminsterfullerene の自由回転運動における隠れた対称性 $\mathfrak{su}(2) \oplus \mathfrak{su}(2)$ | 6 |
| 3 | 非相対論的水素様原子の力学的対称性 | 7 |
| 3.1 | 非相対論的水素様原子の Schrödinger 方程式 | 7 |
| 3.2 | 角運動量ベクトル | 7 |
| 3.3 | Laplace-Runge-Lenz (LRL) ベクトル | 7 |
| 3.4 | 角運動量ベクトルと LRL ベクトルの間の関係式 | 8 |
| 4 | Buckminsterfullerene 様回転子と非相対論的水素様原子における縮退数 | 9 |
| 4.1 | Buckminsterfullerene の回転準位とその縮退数 | 9 |
| 4.2 | 非相対論的水素様原子の離散的準位とその縮退数 | 9 |
| 5 | 両問題の差異の考察 | 11 |
| | 参考文献 | 11 |
| 付録 A | 付録 | 12 |
| 1.1 | 四次元回転群に付随する Lie 代数 $\mathfrak{so}(4)$ | 12 |
| 1.2 | Lie 代数同型 $\mathfrak{su}(2) \oplus \mathfrak{su}(2) \simeq \mathfrak{so}(4)$ | 13 |
| 1.3 | Lie 代数 $\mathfrak{so}(4)$ の既約表現 | 13 |

1 対称性という言い回しについて

ある Schrödinger 方程式の Hamiltonian と可換な演算子たちが Lie 代数 \mathfrak{g} を成しているとき、Lie 代数 \mathfrak{g} が Schrödinger 方程式の力学的対称性である、という。Lie 代数 $\mathfrak{g}, \mathfrak{h}$ が Schrödinger 方程式の力学的対称性であるときに、 \mathfrak{g} が \mathfrak{h} の真部分代数であるときに、Schrödinger 方程式は \mathfrak{g} よりも大きな対称性 \mathfrak{h} を持つ、という。

2 Buckminsterfullerene の力学的対称性

2.1 Buckminsterfullerene とその慣性モーメント

Buckminsterfullerene は、分子式 C_{60} で表されるサッカーボール状の分子である [1]。この構造は数学的には切頂二十面体 (Truncated icosahedron) と呼ばれる多面体に相当する [2]。

以下の点 (複合任意とする) たち

$$\begin{aligned}(0, \pm 1, \pm 3\varphi) \\ (\pm 1, \pm(2 + \varphi), \pm 2\varphi) \\ (\pm\varphi, \pm 2, \pm(2\varphi + 1))\end{aligned}$$

について*1座標の偶置換*2で得られる、60個の頂点は切頂二十面体をなす [2]。

本ノートでは Buckminsterfullerene を各頂点に質量 1 の質点を持つ剛体と見なす。このとき慣性モーメント

$$I_{ij} = \int d^3x x^i x^j \rho(x)$$

を計算すると、

$$\begin{aligned}I_{xx} = I_{yy} = I_{zz} = 491.246117974979\dots \\ I_{xy} = I_{yz} = I_{zx} = 0\end{aligned}$$

となり、直交する 3 つの慣性主軸*3に対応する慣性モーメント係数は同一となる。従って、Buckminsterfullerene は回転子としては密度が均一な剛体球*4と同様であることがわかる。

2.2 剛体の自由回転運動の古典力学

剛体の力学によれば剛体には直交する 3 つの慣性主軸が存在し、それぞれに対応した慣性モーメント係数が存在する。特に剛体球についてはこれらの慣性モーメント係数は一致する。とりあえずは球とは

*1 φ は黄金比。

*2 座標の偶置換とは (x, y, z) に対して $(y, z, x), (z, x, y)$ のことである。

*3 はじめから慣性モーメントテンソルは対角化されているので、 x, y, z の各軸が慣性主軸に他ならない。

*4 以下の記述ではしばしば「密度が均一な」を省略する。

限らない剛体を考える。直交する慣性主軸 A, B, C を選び、それぞれの慣性モーメント係数を I_a, I_b, I_c とする。

ここで剛体とともに動く座標系 ABC を考える。この座標系を用いて描く速度が $\boldsymbol{\omega} = (\omega_a, \omega_b, \omega_c)$ と表されるとすると、自由回転する剛体球のエネルギーは

$$H = \sum_{i=a,b,c} \frac{I_i \omega_i^2}{2} \quad (1)$$

となる。また座標系 ABC 表示での角運動量を $\mathbf{L} = (L_a, L_b, L_c)$ とすると、

$$L_i = I_i \omega_i \quad (2)$$

という関係が成立する。これを用いるとエネルギーは

$$H = \frac{\boldsymbol{\omega} \cdot \mathbf{L}}{2} = \sum_{i=a,b,c} \frac{L_i^2}{2I_i} \quad (3)$$

とも表される。

ここで、実験室座標系 xyz を考える。ただし原点は座標系 ABC と一致させる。この座標系を結びつける Euler 角を (ϕ, θ, ψ) とする。(Landau-Lifshitz 力学 [3] と同じ定義) このとき $\dot{}$ を時間微分として、

$$\begin{aligned} \omega_a &= \dot{\phi} \sin \theta \sin \psi + \dot{\theta} \cos \psi \\ \omega_b &= \dot{\phi} \sin \theta \cos \psi - \dot{\theta} \sin \psi \\ \omega_c &= \dot{\phi} \cos \theta + \dot{\psi} \\ L_a &= I_a (\dot{\phi} \sin \theta \sin \psi + \dot{\theta} \cos \psi) \\ L_b &= I_b (\dot{\phi} \sin \theta \cos \psi - \dot{\theta} \sin \psi) \\ L_c &= I_c (\dot{\phi} \cos \theta + \dot{\psi}) \end{aligned} \quad (4)$$

のように Euler 角を用いて座標 ABC における角速度や角運動量を表すことができる。

自由運動の Lagrangian $L(\phi, \theta, \psi)$ がエネルギー H と同じであることに注意すると、各 Euler 角と共役な正準変数 (一般化運動量) が

$$\begin{aligned} p_\phi &= \frac{\partial L}{\partial \dot{\phi}} = L_a \sin \theta \sin \psi + L_b \sin \theta \cos \psi + L_c \cos \theta \\ p_\theta &= \frac{\partial L}{\partial \dot{\theta}} = L_a \cos \psi - L_b \sin \psi \\ p_\psi &= \frac{\partial L}{\partial \dot{\psi}} = L_c \end{aligned} \quad (5)$$

のように求まる。

逆に一般化運動量を用いて角運動量を表示することもできる。すなわち、

$$\begin{aligned} L_a &= p_\phi \frac{\sin \psi}{\sin \theta} + p_\theta \cos \psi - p_\psi \frac{\cos \theta}{\sin \theta} \sin \psi \\ L_b &= p_\phi \frac{\cos \psi}{\sin \theta} - p_\theta \sin \psi - p_\psi \frac{\cos \theta}{\sin \theta} \cos \psi \\ L_c &= p_\psi \end{aligned} \quad (6)$$

となる。

2.3 剛体の自由回転運動の量子力学

正準量子化により，剛体の自由回転運動に対応する Schrödinger 方程式を導くことができる．すなわち，

$$p_j = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_j} \quad (7)$$

とすると，Schrödinger 方程式

$$\hat{H}(\phi, \theta, \psi)\Psi(\phi, \theta, \psi) = E\Psi(\phi, \theta, \psi) \quad (8)$$

によって剛体が形成する回転準位のスペクトルを求めることができる．Hamiltonian \hat{H} は演算子となっており，先のエネルギーとして出てきた H の中で一般化運動量を正準量子化に従って微分演算子に置き換えたものである．

Schrödinger 方程式は

$$\sum_{i=a,b,c} \frac{\hat{L}_i^2}{2I_i} \Psi(\phi, \theta, \psi) = E\Psi(\phi, \theta, \psi) \quad (9)$$

となる．（角運動量についても演算子となる）

2.4 Buckminsterfullerene の自由回転運動における $\mathfrak{su}(2)$ 対称性

角運動量演算子につける $\hat{}$ は省略する．まず， $L_1 = -L_a, L_2 = -L_b, L_3 = -L_c$ とおく．すなわち，

$$\begin{aligned} L_1 &= -\frac{\sin \psi}{\sin \theta} \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \phi} - \cos \psi \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\cos \theta}{\sin \theta} \sin \psi \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \psi} \\ L_2 &= -\frac{\cos \psi}{\sin \theta} \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \phi} + \sin \psi \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\cos \theta}{\sin \theta} \cos \psi \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \psi} \\ L_3 &= -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \psi} \end{aligned} \quad (10)$$

このとき，交換関係を計算すると

$$[L_i, L_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} L_k \quad (11)$$

のようにまとめることができる．したがって，これらは $\mathfrak{su}(2)$ 代数の基底となっていることがわかる．

角運動量演算子の自乗 L^2 を計算すると，

$$\begin{aligned} L^2 &= L_1^2 + L_2^2 + L_3^2 \\ &= -\hbar^2 \left(\frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} + \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \psi^2} - 2 \frac{\cos \theta}{\sin^2 \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \frac{\partial}{\partial \psi} + \frac{\cos \theta}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \end{aligned} \quad (12)$$

となる．ここで L^2 は $\mathfrak{su}(2)$ の Casimir 演算子であり，

$$[L^2, L_i] = 0 \quad (13)$$

となる。Buckminsterfullerene においては,

$$I_1 = I_2 = I_3 = I \quad (14)$$

とおくことができるので,

$$\hat{H} = \frac{L^2}{2I} \quad (15)$$

となり,

$$[\hat{H}, L_i] = 0 \quad (16)$$

となる。すなわち, Hamiltonian は角運動量の作用に対して不変であり, $\mathfrak{su}(2)$ が Schrödinger 方程式の対称性であることがわかる。

2.5 Buckminsterfullerene の自由回転運動における隠れた対称性 $\mathfrak{su}(2) \oplus \mathfrak{su}(2)$

Schrödinger 方程式は $\mathfrak{su}(2)$ よりも大きい対称性を持たないのだろうか? **実はより大きな対称性を持つことがわかる。** L^2 の形を見ると, ϕ と ψ に関して対称の形をしていることがわかる。このことから, 各 L_i に対して ϕ と ψ の役割を入れ替えたものについても L^2 と可換であることがわかる。すなわち,

$$\begin{aligned} K_1 &= -\frac{\sin \phi}{\sin \theta} \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \psi} - \cos \phi \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\cos \theta}{\sin \theta} \sin \phi \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \phi} \\ K_2 &= -\frac{\cos \phi}{\sin \theta} \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \psi} + \sin \phi \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\cos \theta}{\sin \theta} \cos \phi \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \phi} \\ K_3 &= -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \phi} \end{aligned} \quad (17)$$

とすると, これらは L^2 と可換であり, \hat{H} とも可換である。また L_i と線型独立であることもわかる。

さらに ϕ と ψ を入れ替えただけなので,

$$[K_i, K_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} K_k \quad (18)$$

や

$$L^2 = K^2 \quad (19)$$

が成立することもわかる。したがって, K_i がなす Lie 代数も $\mathfrak{su}(2)$ に同型である。

そして

$$[L_i, K_j] = 0 \quad (20)$$

であることが計算によりわかる。

演算子 L_i と K_i はそれぞれ独立に $\mathfrak{su}(2)$ を成し, Buckminsterfullerene の自由運動 Schrödinger 方程式は

$$\mathfrak{su}(2) \oplus \mathfrak{su}(2)$$

という Lie 代数で記述される対称性を持つことがわかる。^{*5}

^{*5} さらに大きな対称性を持ち得るかについては本ノートでは議論しない。

3 非相対論的水素様原子の力学的対称性

3.1 非相対論的水素様原子の Schrödinger 方程式

水素様原子における電子運動の Hamiltonian

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m_e} - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m_e} - \frac{\kappa}{r} \quad (21)$$

に対する Schrödinger 方程式を考える.

3.2 角運動量ベクトル

角運動量ベクトル^{*6}は,

$$\mathbf{L} = \sum_{ijk} \epsilon_{ijk} x_i p_j \mathbf{e}_k \quad (22)$$

で定義される. ここで,

$$p_i = \frac{1}{i} \frac{\partial}{\partial x_i}$$

は運動量であり正準交換関係

$$[x_i, p_j] = i\delta_{i,j} \quad (23)$$

を満たしている. 球対称性ポテンシャル下では角運動量保存則として,

$$\begin{aligned} [L_i, H] &= 0 \\ [\mathbf{L}^2, H] &= 0 \end{aligned} \quad (24)$$

が成立する.

角運動量ベクトル \mathbf{L} の各成分は Lie 代数 $\mathfrak{so}(3)$ を成す. 一方, \mathbf{L} の各成分は三次元回転群 $SO(3)$ を生成する. 上記の角運動量保存則は三次元回転操作に対する Hamiltonian の不変性を意味する. 水素用原子に限らず球対称性ポテンシャルの問題では, この保存則 (あるいは不変性) に対応した縮退が存在する.

3.3 Laplace-Runge-Lenz (LRL) ベクトル

Laplace-Runge-Lenz (LRL) ベクトルは

$$\begin{aligned} \mathbf{M} &= \frac{1}{2m_e} (\mathbf{p} \times \mathbf{L} - \mathbf{L} \times \mathbf{p}) - \frac{\kappa}{r} \mathbf{x} \\ &= \frac{1}{m_e} \left(\mathbf{x} \mathbf{p}^2 - (\mathbf{x} \cdot \mathbf{p}) \mathbf{p} - \frac{\hbar}{i} \mathbf{p} \right) - \frac{\kappa}{r} \mathbf{x} \end{aligned} \quad (25)$$

^{*6} 便宜上ベクトルと呼んでいるが, 空間反転に対する変換性を考えると擬ベクトルと言うべきである.

で定義される. ($|\mathbf{x}| = r$ としている.)^{*7}

LRL ベクトルの二乗の演算子は,

$$\mathbf{M}^2 = \frac{2}{m_e}(\mathbf{L}^2 + \hbar^2)H + \kappa^2 \quad (26)$$

のように表すことができる.

クーロンポテンシャルの問題では角運動量保存則に加えて LRL ベクトル保存則として,

$$[M_i, H] = 0 \quad (27)$$

$$[\mathbf{M}^2, H] = 0 \quad (28)$$

が成立する.

3.4 角運動量ベクトルと LRL ベクトルの間の関係式

角運動量ベクトルの成分と LRL ベクトルの成分の間には交換関係

$$[L_i, L_j] = i\hbar \sum_m \epsilon_{ijm} L_m \quad (29)$$

$$[M_i, L_j] = i\hbar \sum_k \epsilon_{ijk} M_k \quad (30)$$

$$[M_i, M_j] = -\frac{2}{m_e} i\hbar H \sum_m \epsilon_{ijm} L_m \quad (31)$$

が成立する.

また両ベクトルの直交性を表す式

$$\mathbf{M} \cdot \mathbf{L} = \mathbf{L} \cdot \mathbf{M} = 0 \quad (32)$$

が成立する.

\mathbf{L}, \mathbf{M} はそのままの形では, Lie 代数の基底とはならない.^{*8} 式 31 の右辺はスカラーにならないことが障害となっている.

そこで, 演算子が作用する Hilbert 空間を限定する必要がある. \mathbf{L} と H , \mathbf{M} と H はそれぞれ同時対角化可能であることから, 作用する同じエネルギー固有値を持つ縮退した状態からなる Hilbert 空間に限定したときに, 式 31 の右辺で出てくる H をエネルギー固有値 E として置き換えることが可能である. さらに, 式 26 についても置き換えが可能である.

束縛状態を考えると $E < 0$ である. 規格化した LRL ベクトル $\tilde{\mathbf{M}}$ を

$$\mathbf{M} = \tilde{\mathbf{M}} \sqrt{\frac{-2E}{m_e}} \quad (33)$$

^{*7} LRL ベクトルは空間反転に対する変換性からもベクトルと呼ばれるべきものである.

^{*8} ただし, Affine Kac-Moody 代数を成すことが知られている [7].

によって導入すると, $\mathbf{L}, \tilde{\mathbf{M}}$ の各成分は, $\mathfrak{so}(4)$ 代数の交換関係である

$$\begin{aligned} [L_i, L_j] &= i\hbar \sum_m \epsilon_{ijm} L_m \\ [\tilde{M}_i, \tilde{L}_j] &= i\hbar \sum_m \epsilon_{ijm} \tilde{M}_m \\ [\tilde{M}_i, \tilde{M}_j] &= i\hbar \sum_m \epsilon_{ijm} L_m \end{aligned}$$

を満足することがわかる. したがって, この固有エネルギーが等しい状態からなる Hilbert 空間は $\mathfrak{so}(4)$ 代数の一つの既約表現に属することが分かる.*9

付録で示しているように

$$\mathfrak{su}(2) \oplus \mathfrak{su}(2) \simeq \mathfrak{so}(4) \quad (34)$$

であるから, 非相対論的水素原子と Buckminsterfullerene 様回転子の Schrödinger 方程式は同型の Lie 代数が力学的対称性となることがわかる.

4 Buckminsterfullerene 様回転子と非相対論的水素様原子における縮退数

4.1 Buckminsterfullerene の回転準位とその縮退数

付録で A, B となっているところを L, K で読み替える. Buckminsterfullerene の場合は $L^2 = K^2$ という条件が付け加えられるので, $l_a = l_b$ となる既約部分空間が許される. さらに, L^2 が角運動量演算子であることから, $l_a = l_b = l$ としては非負整数値が許され, 非負半整数値は許されない. すべての $\mathfrak{so}(4)$ 代数の既約表現が用いられる訳ではないということである.

したがって, 縮重度は l を非負整数として $(2l+1)^2$ となる. 量子数 l にこのときエネルギーは

$$E_l = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2I} \quad (35)$$

となる.

4.2 非相対論的水素様原子の離散的準位とその縮退数

引き続きあるエネルギー $E < 0$ を持つ縮退する状態からなる Hilbert 空間を考える. このときエネルギー固有値は定まっており,

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{M}}^2 &= \frac{m_e}{-2E} \left\{ \frac{2}{m_e} (\mathbf{L}^2 + \hbar^2) E + \kappa^2 \right\} \\ &= -\mathbf{L}^2 - \hbar^2 - \frac{m_e \kappa^2}{2E} \end{aligned} \quad (36)$$

*9 さらに大きな対称性がなければという但し書きは付く. さらに大きな対称性の有無については本ノートでは議論しない.

となる。ここで、 L^2, \tilde{M}^2 については、 $\mathfrak{so}(4)$ 代数における Casimir 演算子（スカラー）ではないことに注意が必要である。

付録で導入された A, B

$$\begin{aligned} A &= \frac{1}{2} (L + \tilde{M}) \\ B &= \frac{1}{2} (L - \tilde{M}) \end{aligned}$$

について考える。まず、 A^2 は既約表現の中では

$$\begin{aligned} A^2 &= \frac{1}{4} \{L^2 + \tilde{M}^2 + L \cdot \tilde{M} + \tilde{M} \cdot L\} \\ &= \frac{1}{4} \left(-\hbar^2 - \frac{m_e \kappa^2}{2E} \right) \end{aligned} \quad (37)$$

のように Casimir 演算子（スカラー）となる。同様に B^2 についても、

$$B^2 = \frac{1}{4} \left(-\hbar^2 - \frac{m_e \kappa^2}{2E} \right) \quad (38)$$

Casimir 演算子（スカラー）となる。

式 37, 38 より、実は $A^2 = B^2$ であることがわかる。したがって考えている Hilbert 空間は、 $\mathfrak{so}(4)$ 代数の既約表現のうち $l_a = l_b$ という形式のものに属することになる。すべての $\mathfrak{so}(4)$ 代数の既約表現が用いられる訳ではないということである。

考えている既約表現について、 $l_a = l_b = \tilde{l}$ とする。このとき、

$$\hbar^2 \tilde{l}(\tilde{l} + 1) = \frac{1}{4} \left(-\hbar^2 - \frac{m_e \kappa^2}{2E} \right) \quad (39)$$

であるから、

$$E = -\frac{1}{2(2\tilde{l} + 1)^2} \frac{m_e}{\hbar^2} \kappa^2 \quad (40)$$

となる。

ここで \tilde{l} は非負の整数あるいは半整数であり、 $n := 2\tilde{l} + 1$ は正整数となる。^{*10}すなわち、 n を正整数として、

$$E_n = -\frac{1}{2n^2} \frac{m_e}{\hbar^2} \kappa^2 = -\frac{1}{2n^2} \frac{m_e}{\hbar^2} \left(\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \quad (41)$$

が求めるべきエネルギースペクトルである。

縮重度は既約表現の次元であり、

$$(2\tilde{l} + 1)^2 = n^2 \quad (42)$$

となる。

^{*10} \tilde{l} が半整数も許される理由についてはここまでの議論からは出てこない。他の解法との整合性から $n := 2\tilde{l} + 1$ は全ての正整数を動き得る必要があるが、そのためには \tilde{l} が半整数を取ることが許される必要がある。

5 両問題の差異の考察

ともに Lie 代数 $\mathfrak{so}(4)$ が対称性となっているが、許される縮退数（あるいは既約表現）に差異がある。すなわち、Buckminsterfullerene 様回転子については縮退数（既約表現の次元）として奇数の自乗が許されるのに対して、非相対論的水素原子については縮退数（既約表現の次元）として非負整数の自乗が許される。この違いは局所的な幾何学を記述するための道具である Lie 代数の議論では理解し難い。すなわち、大域的な幾何学を記述するのに適した Lie 群の議論を用いることが相応しい。

Buckminsterfullerene 様回転子については Euler 角を変数とする Schrödinger 方程式に帰着したことからわかるように、 $SO(3)$ 上の自由粒子 Schrödinger 方程式と等価である。この Schrödinger 方程式を不変にする Lie 群は $SO(3)$ に作用し、かつ $\mathfrak{so}(4)$ の指数写像として得られるものである。そのような Lie 群の候補としては $SU(2) \times SO(3)$ あるいは $SO(3) \times SO(3)$ が考えられるが、今回の場合は $SO(3) \times SO(3)$ が作用していると考えられる。 L, K それぞれが成す Lie 代数 $\mathfrak{su}(2)$ から指数写像で生成される Lie 群はともに $SO(3)$ だと考えられるからである。

一方、水素様原子については本ノートにある議論からはわからないが、Fock の方法によって S^3 上の自由粒子 Schrödinger 方程式と等価であることが示されている [10]。この Schrödinger 方程式を不変にする Lie 群は $S^3 (\simeq SO(4)/SO(3))$ に作用し、かつ $\mathfrak{so}(4)$ の指数写像として得られるものである。そのような Lie 群の候補としては $SO(4)$ が考えられる。

まとめると以下の表の様になる。

表 1 比較表

| | Buckminsterfullerene 様回転子 | 非相対論的水素様原子 |
|------------------------|---------------------------|--------------------|
| Lie 代数レベルの対称性 | $\mathfrak{so}(4)$ | $\mathfrak{so}(4)$ |
| 許される縮退数 | 奇数の自乗 | 非負整数の自乗 |
| 等価な自由粒子の問題の棲家（対称空間） | $SO(3)$ | S^3 |
| Schrödinger 方程式を不変にする群 | $SO(3) \times SO(3)$ | $SO(4)$ |

参考文献

- [1] [Buckminsterfullerene - Wikipedia](#)
- [2] [Truncated icosahedron - Wikipedia](#)
- [3] Landau-Lifshitz 著『力学』東京図書
- [4] H. B. G. Casimir, Rotation of a Rigid Body in Quantum Mechanics (1. B. Wolter's, Groningen. 1931).
- [5] 後藤鉄男 著『拡がりをもつ素粒子像』岩波書店
- [6] Hara, O., Gotō, T., Tsai, S. Y., & Yabuki, H. (1967). A Quantum Theory of the Rigid Body in Terms of a Two-Component Spinor. Progress of Theoretical Physics, 37(6), 1319-1329.

- [7] Daboul, Jamil, Peter Slodowy, and Claudia Daboul. "The hydrogen algebra as centerless twisted Kac-Moody algebra." *Physics Letters B* 317.3 (1993): 321-328.
- [8] Schiff 著『量子力学上』吉岡書店
- [9] Landau-Lifshitz 著『量子力学 1』東京図書
- [10] V. Fock, *Z. Physik.* 98 (1935) 145.

A 付録

1.1 四次元回転群に付随する Lie 代数 $\mathfrak{so}(4)$

4次元ベクトル空間における回転操作を表す $SO(4)$ 群の生成子は $\mathfrak{so}(4)$ 代数の基底をなす. 同ベクトル空間において原点を通り互いに直交する平面が ${}_4C_2 = 6$ 個存在するが, それぞれの平面の回転操作に対応した部分群を生成する 6 個の角運動量演算子が $SO(4)$ 群の生成子となる. 角運動量演算子は,

$$L_{ij} = x_i p_j - x_j p_i \quad (43)$$

と書かれるが, 生成子となるためにはこの中で 6 個の線形独立なものを選ぶ必要がある. 指標 (i, j) の組を

$$(1, 2), (2, 3), (3, 1), (1, 4), (2, 4), (3, 4)$$

と選んだときこれらは線形独立である.

角運動量演算子 (とくに独立な 6 個に限る訳ではない) については, 次の交換関係が成立する.

$$\begin{aligned} [L_{ij}, L_{kl}] &= [x_i p_j, x_k p_l] - [x_j p_i, x_k p_l] - [x_i p_j, x_l p_k] + [x_j p_i, x_l p_k] \\ &= \frac{\hbar}{i} \{ \delta_{jk} L_{il} + \delta_{jl} L_{ki} + \delta_{ik} L_{lj} + \delta_{il} L_{jk} \} \end{aligned} \quad (44)$$

ここで,

$$L_{23} = L_1, L_{31} = L_2, L_{12} = L_3, L_{14} = \tilde{M}_1, L_{24} = \tilde{M}_2, L_{34} = \tilde{M}_3 \quad (45)$$

と置くとこれらの間の交換関係は,

$$\begin{aligned} [L_i, L_j] &= i\hbar \sum_m \epsilon_{ijm} L_m \\ [\tilde{M}_i, L_j] &= i\hbar \sum_m \epsilon_{ijm} \tilde{M}_m \\ [\tilde{M}_i, \tilde{M}_j] &= i\hbar \sum_m \epsilon_{ijm} L_m \end{aligned} \quad (46)$$

のように整理される.

1.2 Lie 代数同型 $\mathfrak{su}(2) \oplus \mathfrak{su}(2) \simeq \mathfrak{so}(4)$

$\mathfrak{so}(4)$ 代数は独立な $\mathfrak{su}(2)$ 代数の直和として表現することが出来る。以下にそれを示す。
ベクトル

$$\begin{aligned} \mathbf{A} &= \frac{1}{2} (\mathbf{L} + \tilde{\mathbf{M}}) \\ \mathbf{B} &= \frac{1}{2} (\mathbf{L} - \tilde{\mathbf{M}}) \end{aligned} \quad (47)$$

を導入すると依然として \mathbf{A}, \mathbf{B} の各成分は線形独立である。このとき, \mathbf{A}, \mathbf{B} の各成分について交換関係を計算すると,

$$\begin{aligned} [A_i, A_j] &= i\hbar \sum_m \epsilon_{ijm} A_m \\ [B_i, B_j] &= i\hbar \sum_m \epsilon_{ijm} B_m \\ [A_i, B_j] &= 0 \end{aligned} \quad (48)$$

となり, \mathbf{A}, \mathbf{B} の各成分はそれぞれが独立に $\mathfrak{su}(2)$ 代数 ($\mathfrak{so}(3)$ 代数と代数同型) の基底となっており, 部分代数を成していることが分かる。

1.3 Lie 代数 $\mathfrak{so}(4)$ の既約表現

階数が 2 なので $\mathfrak{so}(4)$ 代数では独立な Casimir 演算子 (各基底と交換可能な演算子) が二つ存在する。例えば A^2 と B^2 を選べる。したがって, $\mathfrak{so}(4)$ 代数の既約表現を考えたときにその表現空間では A^2 や B^2 はスカラーとなる。さらに, その表現空間は A^2 の既約部分空間と B^2 の既約部分空間の直積となる。

\mathbf{A} の成分を基底とする $\mathfrak{su}(2)$ 代数の既約部分空間は, 非負の整数または半整数 l_a で指定され,

$$\{|l_a, m_a\rangle_a | m_a = -l_a, -l_a + 1, \dots, l_a - 1, l_a\}$$

のように表される。ただし, $|l_a, m_a\rangle_a$ は A^2, A_3 の同時固有状態であり,

$$A^2 |l_a, m_a\rangle_a = l_a(l_a + 1)\hbar^2 |l_a, m_a\rangle_a \quad (49)$$

$$A_3 |l_a, m_a\rangle_a = m_a \hbar |l_a, m_a\rangle_a \quad (50)$$

である。

同様に \mathbf{B} の成分を基底とする $\mathfrak{su}(2)$ 代数の既約部分空間は, 非負の整数または半整数 l_b で指定され,

$$\{|l_b, m_b\rangle_b | m_b = -l_b, -l_b + 1, \dots, l_b - 1, l_b\}$$

のように表される。ただし, $|l_b, m_b\rangle_b$ は B^2, B_3 の同時固有状態であり,

$$B^2 |l_b, m_b\rangle_b = l_b(l_b + 1)\hbar^2 |l_b, m_b\rangle_b \quad (51)$$

$$B_3 |l_b, m_b\rangle_b = m_b \hbar |l_b, m_b\rangle_b \quad (52)$$

である。

したがって, l_a, l_b を指定したときに, A^2 や B^2 の各固有状態の直積の形で表される $(2l_a + 1)(2l_b + 1)$ 個の状態からなる Hilbert 空間

$$\{|l_a, m_a\rangle_a |l_b, m_b\rangle_b |$$
$$m_a = -l_a, -l_a + 1, \dots, l_a - 1, l_a, m_b = -l_b, -l_b + 1, \dots, l_b - 1, l_b\}$$

が $\mathfrak{so}(4)$ 代数の一つの既約表現に属する。