Laguerre 関数と su(1,1) のユニタリ表現論

～水素原子の Schrödinger の解法を通じて～

adhara*

2018 年 4 月 21 日

目次

* Twitter @adhara_mathphys

1　序論

水素原子の Schrödinger による解法[*1]（球座標での変数分離解法）は量子力学の成立において重要な役割を果たしている。この解法で出てくる動径部分の波動関数は Laguerre の陪多項式を用いて表され、その性質はよくわかっている。

一方で、この異なる量子数[*2]を持つ動径部分の波動関数間の関係性、というのは若干わかりにくいものとなっている。これは、異なる量子数を持つ動径部分の波動関数はそのままでは直交系を成さないことに起因する。[*3]

実は方程式を変換することで重みなしで固有関数が直交系をなすようにできる。さらにこの固有値問題の解はリー代数 $\mathfrak{su}(1,1)$ のユニタリ表現となっており、特に角運動量量子数が同じ固有関数は既約ユニタリ表現となることがわかる。このことを利用して水素原子問題を解く方法を $\mathfrak{su}(1,1)$ 解法と呼ぶ。

本ノートの目的は水素原子の二つの解法である Schrödinger の解法と $\mathfrak{su}(1,1)$ 解法を通じて、Laguerre 関数（陪多項式）

---

*1 Schrödinger, E. (1926), Quantisierung als Eigenwertproblem. Ann. Phys., 384: 361-376. doi:10.1002/andp.19263840404

*2 ここでは角運動量量子数が同じで主量子数が異なる状態を指す

*3 重み r を導入すると直交させることは可能である。

と $\mathfrak{su}(1,1)$ 解法のユニタリ表現の関係を明らかにすることである。

本ノートは以下の構成になる。第二節では問題設定と動径部分の微分方程式の導出等の多少の準備を行う。第三節では Schrödinger による解法について述べる。第四節では $\mathfrak{su}(1,1)$ 解法について述べる。第五節で両解法の関係性を眺めて、Laguerre 関数（陪多項式）と $\mathfrak{su}(1,1)$ のユニタリ表現の関係性を明らかにする。

2 問題と準備

水素様原子に対する Schrödinger 方程式、

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

の束縛状態のスペクトル（すなわち $E < 0$ の固有状態）を求めることを考える。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。

中心力ポテンシャルの問題なので、球座標表示 (r,θ,ϕ) で解

くことができる。中心力下ポテンシャルでは、よく知られているように角運動量演算子 $\boldsymbol{L} = \boldsymbol{r} \times (-i\hbar\nabla_{\boldsymbol{r}})$ に対して、$\boldsymbol{L}^2$ が保存する。球座標表示にして、角運動量演算子を用いるとシュレディンガー方程式は

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

のように書き換えられる。よく知られているように角度部分と動径部分は変数分離することが出来る、すなわち球面調和関数を用いて、

$$\Psi(\boldsymbol{r}) = Y_{lm}(\theta, \phi) R_l(r) \tag{2}$$

と書くことが出来る。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、

$$\boldsymbol{L}^2 Y_{lm}(\theta, \phi) = l(l+1)\hbar^2 Y_{lm}(\theta, \phi) \tag{3}$$

$$\boldsymbol{L}_z Y_{lm}(\theta, \phi) = m\hbar Y_{lm}(\theta, \phi) \tag{4}$$

である。さらに規格化条件

$$\int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\pi} \sin\theta d\theta \left|Y_{lm}(\theta, \phi)\right|^2 = 1 \tag{5}$$

が成立している。

したがって、動径部分の固有値方程式

$$\left[r\frac{d^2}{dr^2}+2\frac{d}{dr}-\frac{l(l+1)}{r}+2\kappa\frac{m_e}{\hbar^2}+2E\frac{m_e}{\hbar^2}r\right]R_l(r)=0 \tag{6}$$

に帰着する。

さらに $\beta>0$ を

$$\beta^2=-\frac{\kappa^2}{2E}\frac{m_e}{\hbar^2}(>0) \tag{7}$$

を満たす数、$\alpha>0$ を

$$\alpha^2=-2E\frac{m_e}{\hbar^2}=\left(\frac{m_e\kappa}{\beta\hbar^2}\right)^2 \tag{8}$$

を満たす数とすると、式 6 は、

$$\frac{1}{2}\left[-r\frac{d^2}{dr^2}-2\frac{d}{dr}+\frac{l(l+1)}{r}+\alpha^2 r\right]R_l(r)=\alpha\beta R_l(r) \tag{9}$$

となる。さらに変数変換

$$t=\alpha r \tag{10}$$

を行うと、

$$\frac{1}{2}\left[-t\frac{d^2}{dt^2}-2\frac{d}{dt}+\frac{l(l+1)}{t}+t\right]R_l(t/\alpha)=\beta R_l(t/\alpha) \tag{11}$$

と変換できる。

以下、この固有値方程式 11 を解く。

3 Schrödinger の解法

3.1 Laguerre 関数に関する微分方程式

Laguerre 関数

$$L_n^\mu(t) = \frac{(\mu+1)_n}{n!} M(-n; \mu+1; t) \tag{12}$$

を用いて[*4]関数

$$\Phi_n^\mu(t) = e^{-t} t^{(\mu+1)/2} L_n^\mu(2t) \tag{13}$$

を定義すると、

$$\frac{1}{2}\left[-t\frac{d^2}{dt^2} + \frac{\mu^2-1}{4t} + t\right]\Phi_n^\mu(t) = \frac{2n+\mu+1}{2}\Phi_n^\mu(t) \tag{14}$$

が成立している。[*5]実は、ラゲール関数を n が実数になるように拡張可能であり、これによって定義される Φ_n^μ についても式

[*4] $M(\alpha;\beta;t) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(\alpha)_k}{(\beta)_k} \frac{t^k}{k!}$ は第一種合流型超幾何関数

[*5] 二階微分方程式なのでもう一つ解があるはずであるが境界条件から適さない。これに関してはいずれ詳しく記述したい。

14 は成立する。[*6] $n \geq 0, k \geq 0$ が整数の時、

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x} x^k L_n^k(x) L_m^k(x) = \frac{(n+k)!}{n!} \delta_{n,m} \tag{15}$$

のような直交関係が成立するので、$\Phi_n^k(x)$ が直交するためには重み x^{-1} が必要となる。[*7]

3.2 Schrödinger の解法

Schrödinger の解法は式 11 の一階微分の項を消去し、Laguerre 関数の微分方程式 14 の形に持ち込む方法である。これは、

$$\varphi_l(t) = tR_l(t/\alpha) \tag{16}$$

とすることによって可能である。すなわち、

$$\frac{1}{2}\left[-t\frac{d^2}{dt^2} + \frac{l(l+1)}{t} + t\right]\varphi_l(t) = \beta\varphi_l(t) \tag{17}$$

となる。式 17 と式 14 を見比べると、式 17 の解は

$$\varphi_l(t) = \Phi_{\beta-l-1}^{2l+1}(t) \tag{18}$$

[*6] 非負整数 n を実数 ν に拡張する場合は $L_\nu^\mu(x) = \frac{\Gamma(\mu+\nu+1)}{\Gamma(\nu+1)\Gamma(\mu+1)} M(-n; \mu+1; x)$

[*7] G. B. Arfken, H. J. Weber: "Mathematical Methods For Physicists", 6th edition (2005), ELSEVIER.

となる。ここで、束縛状態における境界条件である

$$\lim_{r\to\infty} R_l(r) = 0 \tag{19}$$

を考慮すると、

$$\beta - l - 1 \in \mathbb{Z}_{\geq 0} \tag{20}$$

という条件が課される。すなわち β は $l+1$ 以上の整数である必要がある。[*8]これを N と書き主量子数と呼ぶ。これに対応する E, α を E_N, α_N と書くと、

$$E_N = -\frac{1}{2N^2}\frac{m_e}{\hbar^2}\kappa^2 \tag{21}$$

$$\alpha_N = \frac{m_e \kappa}{N\hbar^2} \tag{22}$$

となる。

動径部分波動関数は角運動量量子数 l と主量子数 N によることになるので、これを R_{Nl} と書くことにすると、規格化因子を除いて

$$\begin{aligned} R_{Nl}(r) &= \Phi^{2l+1}_{N-l-1}(\alpha_N r)/(\alpha_N r) \\ &= e^{-\alpha_N r}(\alpha_N r)^l L^{2l+1}_{N-l-1}(2\alpha_N r) \end{aligned} \tag{23}$$

となる。従って、同一の l に対して r を重みとすると $\{R_{Nl}(r)\}$ は直交系をなす。

[*8] これについてもいずれ詳しく書きたい。

4　$\mathfrak{su}(1,1)$ 解法

4.1　$\mathfrak{su}(1,1)$ 代数の導入

$\mathfrak{su}(1,1)$ 代数は三次元ベクトル空間上で定義されるリー代数であり、生成子 K_0, K_1, K_2 に対して、

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

$$[K_0, K_1] = \mathrm{i}K_2 \tag{25}$$

$$[K_2, K_0] = \mathrm{i}K_1 \tag{26}$$

が成立するものである。第一式の右辺の符号が $+$ となった場合は、$\mathfrak{su}(2)$ 代数になる。

$\mathfrak{su}(2)$ と $\mathfrak{su}(1,1)$ は次元が同じだが、性質が著しく異なる部分がある。すなわち、$\mathfrak{su}(2)$ から生成されるリー群がコンパクトであるのにたいして、$\mathfrak{su}(1,1)$ ではノンコンパクトとなる。それに伴って既約ユニタリ表現空間の次元が $\mathfrak{su}(1,1)$ では無限となる。

$\mathfrak{su}(2)$ 代数同様、昇降演算子を定義できる。$K_\pm = K_1 \pm iK_2$ としたときに、

$$[K_0, K_\pm] = \pm K_\pm, [K_+, K_-] = -2K_0, K_+^\dagger = K_- \tag{27}$$

が成立する。さらに、全ての生成子とのリーブラケット演

算が 0 となるようなカシミール演算子が存在する。すなわち、

$$C = K_0^2 - K_1^2 - K_2^2 = K_0^2 - \frac{1}{2}\left(K_+K_- + K_-K_+\right) \tag{28}$$

がカシミール演算子である。所々で、やはり $\mathfrak{su}(2)$ のものとは符号が異なっているので注意されたい。

ユニタリ表現は C, K_0 の同時固有状態として、記述することができる。

$$\begin{aligned} C|k,m'\rangle &= k(k-1)|k,m'\rangle \\ K_0|k,m'\rangle &= (k+m')|k,m'\rangle \end{aligned} \tag{29}$$

$k > 0$ は実数、m' は非負整数である。k が同じ固有状態は、同じ既約表現に属する。

対応する固有状態は昇演算子を用いて、

$$|k,m'\rangle = \sqrt{\frac{\Gamma(2k)}{m'!\Gamma(2k+m')}}\left(K_+\right)^{m'}|k,0\rangle \tag{30}$$

のように表す事ができる。これは、

$$K_-K_+ = K_0^2 + K_0 - C \tag{31}$$

$$\langle k,m'|K_-K_+|k,m'\rangle = (m'+1)(2k+m') \tag{32}$$

などから求めることができる。

4.2 $\mathfrak{su}(1,1)$ 解法

まず、元の動径部分微分方程式 11 の固有関数が重み 1 で直交系をなすように微分方程式を変形するのだが、これは難しくはない。すなわち、l を同じくする固有関数は r を重みとして直交系を成すのだから、これらの固有関数に $r^{\frac{1}{2}}$ を掛けたものは直交系を成すはずであり、これを解とするような固有方程式を作れば良い。そのためには

$$\psi_l(t) = t^{\frac{1}{2}} R_l(t/\alpha) \tag{33}$$

を導入する。これらは微分方程式

$$\frac{1}{2}\left[-t\frac{d^2}{dt^2} - \frac{d}{dt} + \frac{\left(l+\frac{1}{2}\right)^2}{t} + t\right]\psi_l(t) = \beta\psi_l(t) \tag{34}$$

を満たす。この l を同じくする方程式の固有関数は、直交系をなすことになる。

ここで 34 左辺を K_0、すなわち、

$$K_0 = \frac{1}{2}\left[-t\frac{d^2}{dt^2} - \frac{d}{dt} + \frac{\left(l+\frac{1}{2}\right)^2}{t} + t\right] \tag{35}$$

とする。さらに

$$K_+ = \frac{1}{2}\left[-t\frac{d^2}{dt^2} - \frac{d}{dt} + \frac{\left(l+\frac{1}{2}\right)^2}{t} - t + 2t\frac{d}{dt} + 1\right] \tag{36}$$

とおくと、

$$\left[t\frac{d^2}{dt^2}\right]^\dagger = 2\frac{d}{dt} + t\frac{d^2}{dt^2}$$
$$\left[t\frac{d}{dt}\right]^\dagger = -t\frac{d}{dt} - 1$$
$$\left[\frac{d}{dt}\right]^\dagger = -\frac{d}{dt}$$

により、

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

となる。

$K_+^\dagger = K_-$ とみなすと、式 27

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

が成立することがわかる。従って、$K_1 \pm \mathrm{i}K_2 = K_\pm$ となる K_1, K_2 と K_0 は $\mathfrak{su}(1,1)$ 代数の基底となることがわかる。

ここで Casimir 演算子は計算により

$$
\begin{aligned}
C &= K_0^2 - \frac{1}{2}\left(K_+K_- + K_-K_+\right) \\
&= l(l+1)
\end{aligned} \tag{37}
$$

となることがわかる。

式 29 の表記を用いると、$k = l+1, m' = \beta - l - 1$ の時 34 の解となり、

$$
\begin{aligned}
C|l+1, \beta - l - 1\rangle &= l(l+1)|l+1, \beta - l - 1\rangle \\
K_0|l+1, \beta - l - 1\rangle &= \beta|l+1, \beta - l - 1\rangle
\end{aligned} \tag{38}
$$

となる。ここで $k = l+1 > 0$ は成立している。また、β としては $l+1$ 以上の整数が許される。これを N と書いて、対応する E, α を E_N, α_N と書くと、

$$
E_N = -\frac{1}{2N^2}\frac{m_e}{\hbar^2}\kappa^2 \tag{39}
$$

$$
\alpha_N = \frac{m_e\kappa}{N\hbar^2} \tag{40}
$$

となる。すなわち、Schrödinger の解法の解と一致する。

また、N に対応する ψ_l を $\psi_{N,l}$ とかくと、

$$
\psi_{N,l} = |l+1, N - l - 1\rangle \tag{41}
$$

となる。

5　Laguerre 関数（陪多項式）と $\mathfrak{su}(1,1)$ のユニタリ表現の関係性

式 33 と式 23 と式 41 より、規格化因子を除いて、

$$|l+1, N-l-1\rangle = e^{-\alpha_N r}(\alpha_N r)^{l+\frac{1}{2}} L_{N-l-1}^{2l+1}(2\alpha_N r) \tag{42}$$

となることがわかる。従って、動径部分の波動関数は、

$$\begin{aligned}
&R_{Nl}(r) \\
&= r^{-\frac{1}{2}}|l+1, N-l-1\rangle \\
&= r^{-\frac{1}{2}}\sqrt{\frac{\Gamma(2k)}{(N-l-1)!\Gamma(2k+N-l-1)}}K_+^{N-l-1}|l+1,0\rangle \\
&= r^{-\frac{1}{2}}\sqrt{\frac{\Gamma(2k)}{(N-l-1)!\Gamma(2k+N-l-1)}}K_+^{N-l-1}r^{\frac{1}{2}}R_{l+1l}(r) \\
&= \sqrt{\frac{\Gamma(2k)}{(N-l-1)!\Gamma(2k+N-l-1)}}\left(r^{-\frac{1}{2}}K_+ r^{\frac{1}{2}}\right)^{N-l-1}R_{l+1l}(r)
\end{aligned} \tag{43}$$

などと書けることがわかる。

従って、

$$\left(r^{-\frac{1}{2}}K_+ r^{\frac{1}{2}}\right)^{N-l-1} \tag{44}$$

は主量子数の上昇演算子を表し、

$$\left(r^{-\frac{1}{2}}K_{-}r^{\frac{1}{2}}\right)^{N-l-1} \tag{45}$$

は主量子数の下降演算子を表すことがわかる。

■直交性について

実は $\mathfrak{su}(1,1)$ の異なる既約表現に属する固有関数（すなわち異なる角運動量量子数に対応するもの）同士は直交する。これは、異なる既約表現に属する固有関数でカシミール演算子 C を挟んで計算すれば容易にわかることである。すなわち、C はエルミートなので、

$$\begin{aligned}\langle k,m'|C|',m''\rangle &= k(k-1)\langle k,m'|k',m''\rangle \\ &= k'(k'-1)\langle k,m'|k',m''\rangle \end{aligned} \tag{46}$$

となる。$k,k'>0$ より $k\neq k'$ は $k(k-1)\neq k'(k'-1)$ を表し、$\langle k,m'|k',m''\rangle\neq 0$ がわかる。