# $so(4)$ 代数を使った水素様原子エネルギースペクトルの解法

adhara*

2016 年 12 月 18 日

## 1　問題

水素様原子における電子のハミルトニアン

$$H = -\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m_e} - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m_e} - \frac{\kappa}{r} \tag{1}$$

の束縛状態エネルギースペクトルを $so(4)$ 代数を利用して求める。

* Twitter @adhara_mathphys

# 2　準備

証明や計算は別のノートで済ませているので、式と簡単な説明のみ載せる。

## 2.1　角運動量ベクトル

角運動量ベクトルは、

$$\boldsymbol{L} = \sum_{ijk} \epsilon_{ijk} x_i p_j \boldsymbol{e}_k \tag{2}$$

で定義される。球対称性ポテンシャル下では角運動量保存則として、

$$[L_i, H] = 0 \tag{3}$$
$$\left[\boldsymbol{L}^2, H\right] = 0 \tag{4}$$

が成立する。球対称性ポテンシャルの問題では、この保存則に対応した縮退が必ず存在する。球対称性をもつということはハミルトニアンを不変にする対称操作が $O(3)$ 群を成すということである。空間反転対称性に関する対称操作を除いた対称操作としては $SO(3)$ 群を成す。

保存則 4 より、角運動量の二乗 $\boldsymbol{L}^2$ とハミルトニアンは同時対角化可能となる。したがって、$H$ の各固有状態は $\boldsymbol{L}^2$ の

固有状態でもある。$so(3)$ 代数を用いることで $2l+1$ 重縮退したハミルトニアンの固有状態が存在し、対応する固有値が $\hbar^2 l(l+1)$ となることが分かる。（$l$ は非負整数）縮退した固有状態空間は $SO(3)$ 群の一つの既約表現に属する。

## 2.2　Laplace-Runge-Lenz（LRL）ベクトル

Laplace-Runge-Lenz（LRL）ベクトルは

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{M} &= \frac{1}{2m_e}\left(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{L}-\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{p}\right)-\frac{\kappa}{r}\boldsymbol{x} \\
&= \frac{1}{m_e}\left(\boldsymbol{x}\boldsymbol{p}^2-(\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{p})\boldsymbol{p}-\frac{\hbar}{i}\boldsymbol{p}\right)-\frac{\kappa}{r}\boldsymbol{x}
\end{aligned} \tag{5}
$$

で定義される。（$|\boldsymbol{x}|=r$ としている。）

LRL ベクトルの二乗の演算子は、

$$
\boldsymbol{M}^2 = \frac{2}{m_e}(\boldsymbol{L}^2+\hbar^2)H+\kappa^2 \tag{6}
$$

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、

$$
[M_i, H] = 0 \tag{7}
$$

$$
\left[\boldsymbol{M}^2, H\right] = 0 \tag{8}
$$

が成立する。

### 2.3 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

$$[L_i, L_j] = i\hbar \sum_m \epsilon_{ijm} L_m \tag{9}$$

$$[M_i, L_j] = i\hbar \sum_k \epsilon_{ijk} M_k \tag{10}$$

$$[M_i, M_j] = -\frac{2}{m_e} i\hbar H \sum_m \epsilon_{ijm} L_m \tag{11}$$

が成立する。

また両ベクトルの直交性を表す式

$$\boldsymbol{M} \cdot \boldsymbol{L} = \boldsymbol{L} \cdot \boldsymbol{M} = 0 \tag{12}$$

が成立する。

## 3 $so(4)$ 代数の導入

### 3.1 生成子

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 $so(4)$ 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、

$$L_{ij} = x_i p_j - x_j p_i \tag{13}$$

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。

$$\begin{aligned} [L_{ij}, L_{kl}] &= [x_i p_j, x_k p_l] - [x_j p_i, x_k p_l] - [x_i p_j, x_l p_k] + [x_j p_i, x_l p_k] \\ &= \frac{\hbar}{i} \{\delta_{jk} L_{il} + \delta_{jl} L_{ki} + \delta_{ik} L_{lj} + \delta_{il} L_{jk}\} \end{aligned} \tag{14}$$

ここで、

$$L_{23} = L_1, L_{31} = L_2, L_{12} = L_3, L_{14} = \tilde{M}_1, L_{24} = \tilde{M}_2, L_{34} = \tilde{M}_3 \tag{15}$$

と置くとこれらの間の交換関係は、

$$[L_i, L_j] = i\hbar \sum_m \epsilon_{ijm} L_m \tag{16}$$

$$\left[\tilde{M}_i, \tilde{L}_j\right] = i\hbar \sum_m \epsilon_{ijm} \tilde{M}_m \tag{17}$$

$$\left[\tilde{M}_i, \tilde{M}_j\right] = i\hbar \sum_m \epsilon_{ijm} L_m \tag{18}$$

のように整理される。

## 3.2 直和分解

$so(4)$ 代数は独立な $su(2)$ 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

$$\boldsymbol{A} = \frac{1}{2}\left(\boldsymbol{L} + \tilde{\boldsymbol{M}}\right) \tag{19}$$

$$\boldsymbol{B} = \frac{1}{2}\left(\boldsymbol{L} - \tilde{\boldsymbol{M}}\right) \tag{20}$$

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

$$[A_i, A_j] = i\hbar \sum_m \epsilon_{ijm} A_m \tag{21}$$

$$[B_i, B_j] = i\hbar \sum_m \epsilon_{ijm} B_m \tag{22}$$

$$[A_i, B_j] = 0 \tag{23}$$

となり、$\boldsymbol{A}, \boldsymbol{B}$ の各成分はそれぞれが独立に $su(2)$ 代数（$so(3)$ 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。

## 3.3　既約表現

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

$\boldsymbol{A}$ の成分を基底とする $su(2)$ 代数の既約表現空間は、非負の整数または半整数 $l_a$ で指定され、

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

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

$$\boldsymbol{A}^2 |l_a, m_a\rangle_a = l_a(l_a + 1)\hbar^2 |l_a, m_a\rangle_a \tag{24}$$

$$A_3 |l_a, m_a\rangle_a = m_a \hbar |l_a, m_a\rangle_a \tag{25}$$

である。

同様に $\boldsymbol{B}$ の成分を基底とする $su(2)$ 代数の既約表現空間

は、非負の整数または半整数 $l_b$ で指定され、

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

のように表される。同様に $|l_b, m_b\rangle_b$ は $\boldsymbol{B}^2, B_3$ の同時固有状態であり、

$$\boldsymbol{B}^2 |l_b, m_b\rangle_b = l_b(l_b+1)\hbar^2 |l_b, m_b\rangle_b \tag{26}$$

$$B_3 |l_b, m_b\rangle_b = m_b\hbar |l_b, m_b\rangle_b \tag{27}$$

である。

したがって、$l_a, l_b$ を指定したときに、$\boldsymbol{A}$ や $\boldsymbol{B}$ の各固有状態の直積の形で表される $(2l_a+1)(2l_b+1)$ 個の状態からなるヒルベルト空間

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

が $so(4)$ 代数の一つの既約表現に属する。

# 4　$so(4)$ 代数の水素様原子の解法への適用

## 4.1　ヒルベルト空間の制限と $so(4)$ 代数の既約表現

$\boldsymbol{L}, \boldsymbol{M}$ はそのままの形では、$so(4)$ 代数の基底と見なすことが出来ない。式 11 の右辺はスカラーにならないことが障害となる。

そこで、演算子が作用するヒルベルト空間を限定する必要がある。$\boldsymbol{L}$ と $H$、$\boldsymbol{M}$ 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ヒルベルト空間に限定したときに、式 11 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 6 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 $\tilde{\boldsymbol{M}}$ を

$$\boldsymbol{M} = \tilde{\boldsymbol{M}} \sqrt{\frac{-2E}{m_e}} \tag{28}$$

によって導入すると、$\boldsymbol{L}, \tilde{\boldsymbol{M}}$ の各成分は、$so(4)$ 代数の交換関係である式 16、17、18 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ヒルベルト空間は $so(4)$ 代数の一つの既約表現に属することが分かる。（さらなる縮退をもたらす別の対称性がなければという但し書きは付く。）

## 4.2　エネルギースペクトルの導出

上記の既約表現に属するヒルベルト空間を考える。このときエネルギー固有値は定まっており、

$$\begin{aligned}\tilde{\boldsymbol{M}}^2 &= \frac{m_e}{-2E}\left\{\frac{2}{m_e}(\boldsymbol{L}^2+\hbar^2)E+\kappa^2\right\}\\ &= -\boldsymbol{L}^2-\hbar^2-\frac{m_e\kappa^2}{2E}\end{aligned} \tag{29}$$

となる。ここで、$\boldsymbol{L}^2, \tilde{\boldsymbol{M}}^2$ については、$so(4)$ 代数におけるカシミール演算子でなく、スカラーではないことに注意が必要である。

$so(4)$ 代数の導入で定義した $\boldsymbol{A}, \boldsymbol{B}$ について考える。まず、$\boldsymbol{A}^2$ は既約表現の中では

$$\begin{aligned}\boldsymbol{A}^2 &= \frac{1}{4}\left\{\boldsymbol{L}^2+\tilde{\boldsymbol{M}}^2+\boldsymbol{L}\cdot\tilde{\boldsymbol{M}}+\tilde{\boldsymbol{M}}\cdot\boldsymbol{L}\right\}\\ &= \frac{1}{4}\left(-\hbar^2-\frac{m_e\kappa^2}{2E}\right)\end{aligned} \tag{30}$$

のようにスカラーとなる。同様に $\boldsymbol{B}^2$ については、

$$\boldsymbol{B}^2 = \frac{1}{4}\left(-\hbar^2-\frac{m_e\kappa^2}{2E}\right) \tag{31}$$

となる。

式 30、31 より、実は $\boldsymbol{A}^2 = \boldsymbol{B}^2$ であることがわかる。したがって考えているヒルベルト空間は、$so(4)$ 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ことになる。すべての $so(4)$ 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、

$$\hbar^2 \tilde{l}(\tilde{l}+1) = \frac{1}{4}\left(-\hbar^2 - \frac{m_e \kappa^2}{2E}\right) \tag{32}$$

であるから、

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

となる。ここで $\tilde{l}$ は非負の整数あるいは半整数なので、$n := 2\tilde{l}+1$ は正整数となることがわかる。すなわち、$n$ を正整数として、

$$E_n = -\frac{1}{2n^2}\frac{m_e}{\hbar^2}\kappa^2 = -\frac{1}{2n^2}\frac{m_e}{\hbar^2}\left(\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0}\right)^2 \tag{34}$$

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、

$$(2\tilde{l}+1)(2\tilde{l}+1) = n^2 \tag{35}$$

となる。

## 4.3　角運動量について

束縛状態のエネルギースペクトルと縮重度は完全にわかった。エネルギーが $E_n$ となる縮退した状態はどのような角運動量をもつのであろうか？これを明らかにするためには角運動量の演算子 $\boldsymbol{L}^2, \boldsymbol{L}_3$ の固有値で固有状態をラベリングし直す必要がある。すなわち、$so(4)$ 代数の一つの既約表現に属していたヒルベルト空間をを $so(3)$ 代数の既約表現に属するいくつかのヒルベルト空間に既約分解する必要がある。

これを行うためには、

$$\boldsymbol{L} = \boldsymbol{A} + \boldsymbol{B} \tag{36}$$

であることに着目する。これは、角運動量子数 $l = \frac{n-1}{2}$ をもつ二つの粒子の合成角運動量を考える問題と等価である。合成角運動量の計算手法を用いると、$\tilde{l} = \frac{n-1}{2}$ でラベリングされる $so(4)$ 代数の既約表現空間は角運動量子数が $l = 0, 1, \cdots, n-1$ となる、$n$ 個の既約表現空間（$so(3)$ 代数の）に既約分解されることが分かる。角運動量子数 $l$ の既約表現空間では、$\boldsymbol{L}^2$ の固有値は $\hbar^2 l(l+1)$ となり、（$\boldsymbol{L}$ の成分が基底となる $so(3)$ 代数の範疇では $\boldsymbol{L}^2$ がカシミール演算子であり、既約表現空間ではスカラーとなる）表現空間の次元は $2l+1$ である。