水素様原子の電子ハミルトニアンを考える。（so(3)対称性はある）

$$H\Psi(\boldsymbol{r}) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m_e}\nabla^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\frac{Z}{r}\right]\Psi(\boldsymbol{r}) = E\Psi(\boldsymbol{r})$$

角運動量演算子 L 、Laplace-Runge-Lenz （LRL）ベクトル M を導入する。

$$\boldsymbol{L} = \boldsymbol{r} \times \boldsymbol{p}$$

$$\boldsymbol{M} = \frac{1}{2m_e}(\boldsymbol{p} \times \boldsymbol{L} - \boldsymbol{L} \times \boldsymbol{p}) - \frac{\kappa \boldsymbol{r}}{r}$$

ただし、ϰ という量を導入した。

$$\kappa = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0}$$

次の交換関係が成立する。

$$[L_i, L_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}L_k \quad [M_i, M_j] = -i\hbar\frac{2H}{m_e}\epsilon_{ijk}L_k$$

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

また、LRLベクトルの二乗は次のような形に計算される。

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

角運動量ベクトルとLRLベクトルは直交する。

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

角運動量、LRLベクトル、それぞれの二乗はハミルトニアンと交換可能である。

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

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

したがって、L^2、M^2、H の同時固有状態からなる部分ヒルベルト空間を考えることが出来る。この部分ヒルベルト空間はそれぞれがエネルギー縮退している。

以下の議論では E<0 とし、H、L、M、の各演算子が作用する状態空間をエネルギー固有値（H の固有値）が E となる部分ヒルベルト空間に限定する。

このとき H を E に置き換えてよい。

ここで、規格化LRLベクトルM^~を定義する。

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

このとき、LとM^~の間の交換関係は次のようにまとめられる。

$$[L_i, L_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}L_k \quad \left[\tilde{M}_i, \tilde{M}_j\right] = i\hbar\epsilon_{ijk}L_k \quad \left[\tilde{M}_i, L_j\right] = i\hbar\epsilon_{ijk}\tilde{M}_k$$

L と M^~ の各成分は、so(4)代数の基底となることが分かった。

so(4) 代数の既約表現を調べることに帰着するが、so(4) 代数が独立した su(2) 代数の直和となっていることを利用するのがよい。

すなわち、基底変換により新たなベクトル A、B を以下のように定義すると、

$$\boldsymbol{A} = \frac{1}{2}\left(\boldsymbol{L} + \tilde{\boldsymbol{M}}\right) \quad \boldsymbol{B} = \frac{1}{2}\left(\boldsymbol{L} - \tilde{\boldsymbol{M}}\right)$$

A、B の間の交換関係は以下のようになる。

$$[A_i, A_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}A_k \quad [B_i, B_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}B_k \quad [A_i, B_j] = 0$$

したがって、A、B は独立に su(2) 代数の基底となる。

so(4) 代数のカシミール演算子として独立なものは本来 2 つあるが、これは A^2 と B^2 を取ることが出来る。
しかしながら、計算するとこれらは一致してしまう。

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

これは、M・L = 0 に由来するものであり、一般の so(4) 代数で起きるものではない。
（一般の）so(4) 代数の既約表現空間は次のように su(2) 代数の既約表現の直積が張るベクトル空間となる。

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

ただし、

$$\begin{aligned} \boldsymbol{A}^2|l_a, m_a\rangle_a &= l_a(l_a+1)\hbar^2|l_a, m_a\rangle_a \\ A_3|l_a, m_a\rangle_a &= m_a\hbar|l_a, m_a\rangle_a \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \boldsymbol{B}^2|l_b, m_b\rangle_b &= l_b(l_b+1)\hbar^2|l_b, m_b\rangle_b \\ B_3|l_b, m_b\rangle_b &= m_b\hbar|l_b, m_b\rangle_b \end{aligned}$$

となる。la、lb はそれぞれ非負の整数または半整数。

今回は、A^2=B^2 の制限がつくので、

$$l_a = l_b$$

を満たす既約表現空間のみが、部分ヒルベルト空間に該当しうる。

既約表現の指標が la = lb = l^~ であるとき、エネルギーは

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

より、

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

となる。ここで、 $n = 2\tilde{l}+1$ は任意の1以上の整数を取りうる。

n をエネルギーの指標として、

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

と書くことが出来る。

この部分ヒルベルト空間（既約表現空間）の次元は、

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

であり、これが縮重度に他ならない。（もちろんスピンは抜きで）

さらにこの部分ヒルベルト空間（既約表現空間）を角運動量量子数にしたがって分解することを考える。

これは、 $\boldsymbol{L} = \boldsymbol{A} + \boldsymbol{B}$ であることを用いれば、簡単である。

すなわち、A と B をスピン角運動量演算子と見なして、A と B の合成スピン角運動量を L と見なすのである。

角運動量の合成の手法を用いると、角運動量量子数 ℓ で指定される既約表現が得られる。

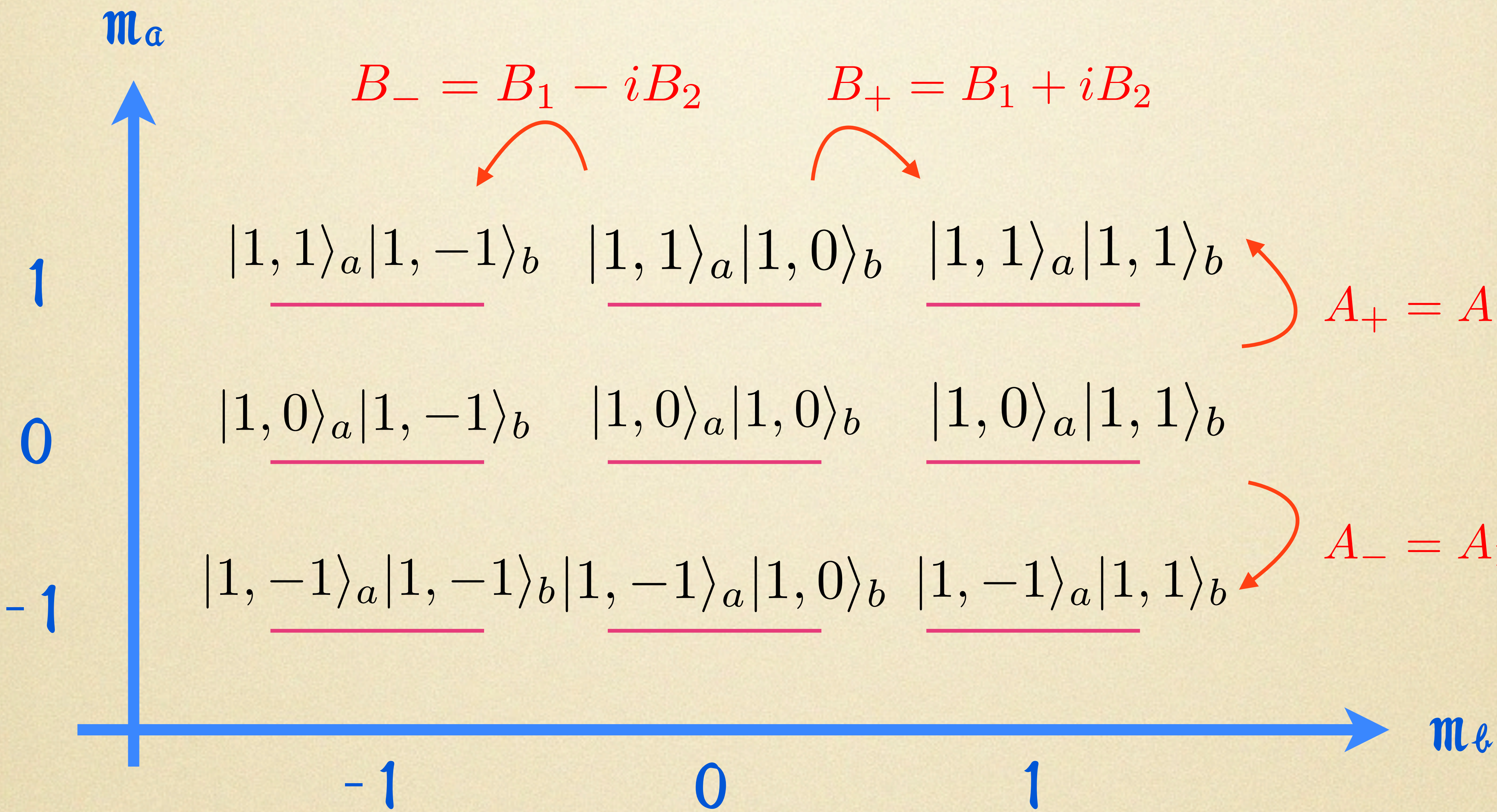
$$\begin{aligned} \boldsymbol{L}^2|l,m\rangle &= l(l+1)\hbar^2|l,m\rangle \\ L_3|l,m\rangle &= m\hbar|l,m\rangle \qquad m=-l,-l+1,\cdots,l-1,l \end{aligned}$$

ただし、ℓ の取りうる値は n-1 〜 0 の整数である。各 ℓ で指定される既約表現に次元は

$$2l+1$$

である。これは SO(3) 対称性に伴う縮重度に一致する。

$\tilde{l} = 1 \leftrightarrow n = 3$ のときは9状態が縮退する。



エネルギーは

$$E_3 = -\frac{1}{2 \cdot 3^2} \frac{m_e}{\hbar^2} \left(\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2$$

角運動量演算子に関する既約表現への分解

記号的表現としては

$$3 \otimes 3 \rightarrow 1 \oplus 3 \oplus 5 \qquad |l, m\rangle = \sum_{m_a, m_b} c_{m_a, m_b, m} |l, m_a\rangle_a |l, m_b\rangle_b$$