

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)

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

角度部分と動径部分に変数分離すると角度部分は球面調和関数となる。

角運動量量子数 l に対して動径部分の関数の固有値方程式を得る。

$$\left\{ \frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} - \frac{l(l+1)}{r^2} + \frac{2Z}{r} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right) \frac{m_e}{\hbar^2} + 2E \frac{m_e}{\hbar^2} \right\} R_l(r) = 0$$

変数変換をして関数 ψ を導入する。

$$R_l(r) = \psi_l(r)/r$$

次の固有値方程式に帰着する。

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} + \frac{2}{r} \left(\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \right) \frac{m_e}{\hbar^2} + 2E_l \frac{m_e}{\hbar^2} \right] \psi_l(r) = 0$$

各運動量量子数 $l \geq 1$ に対して、演算子（上昇／下降）とスカラーを定義する。

$$a_l^\dagger = -\frac{d}{dr} + \frac{l}{r} - \frac{1}{l} \left(\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \right) \frac{m_e}{\hbar^2}$$

$$a_l = \frac{d}{dr} + \frac{l}{r} - \frac{1}{l} \left(\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \right) \frac{m_e}{\hbar^2}$$

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

このとき l に対応するハミルトニアンは次のように書ける。

$$\mathcal{H}_l(r) = a_l^\dagger a_l + c_l$$

さらに、 $l \geq 1$ に対して

$$\mathcal{H}_l(r) = a_{l+1} a_{l+1}^\dagger + c_{l+1} = a_l^\dagger a_l + c_l$$

が成立する。ただし、一つ目の等号は $l = 0$ でも成立している。

エネルギーと対応する固有状態が与えられたときに、

$$\mathcal{H}_l \psi_{l,k} = \epsilon_{l,k} \psi_{l,k}$$

エネルギーと対応する固有状態が与えられたときに、

$$\mathcal{H}_{l+1} a_{l+1}^\dagger \psi_{l,k} = \epsilon_{l,k} a_{l+1}^\dagger \psi_{l,k}$$

$$\mathcal{H}_{l-1} a_l \psi_{l,k} = \epsilon_{l,k} a_l \psi_{l,k}$$

が成立する。(l は適宜定義がなされている範囲。)

また、

$$a_{l+1}^\dagger \psi = 0$$

を満たす ψ は、

$$\mathcal{H}_l \psi = \left[a_{l+1} a_{l+1}^\dagger + c_{l+1} \right] \psi = c_{l+1} \psi$$

より \mathcal{H}_l の固有状態であり固有値は次のようになる。

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

対応するエネルギーは

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

となる。一方上記の ψ を $\psi_{l,0}$ とかくと、

$$a_l \psi_{l,0}, a_{l-1} a_l \psi_{l,0}, \dots, a_1 \dots a_{l-1} a_l \psi_{l,0}$$

はそれぞれ、

$$\mathcal{H}_{l-1}, \mathcal{H}_{l-2}, \dots, \mathcal{H}_0,$$

の固有状態であり、しかもエネルギーは E_l で縮退する。

それぞれ $so(3)$ に基づく縮退を含めると縮重度は

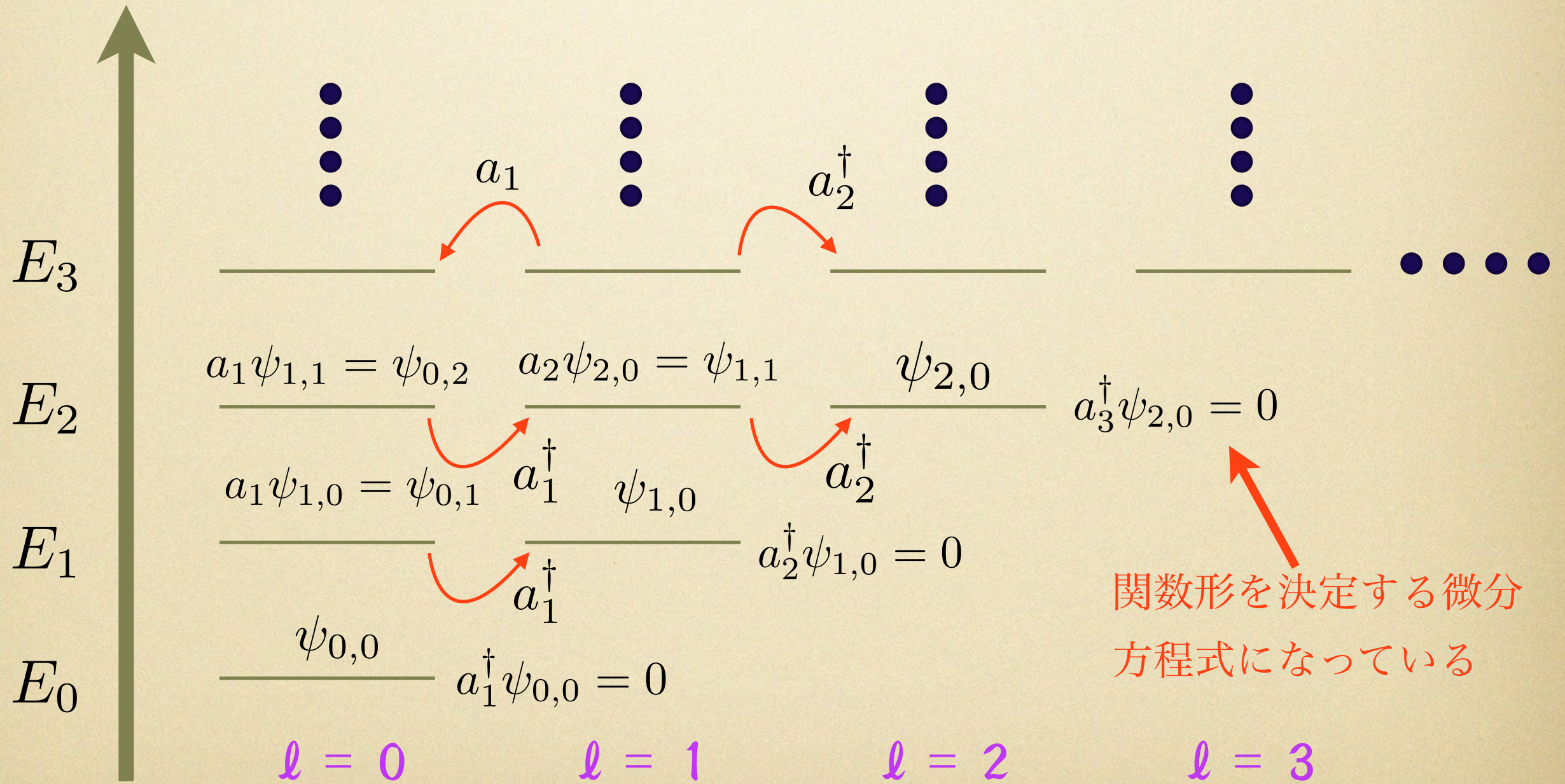
$$(l+1)^2$$

となる。

同じエネルギーで異なる角運動量指数 l をもつ状態間は昇降演算子で結びつく。
 昇降演算子によりほかの状態の関数系を決定することが出来る。

各線が $2l+1$ 重縮退となっている。
 (so(3)対称性起因)

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



関数形を決定する微分
 方程式になっている