水素様原子の電子ハミルトニアンを考える。（ポテンシャルはso(3)対称性をもつ。）

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

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。

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

変数変換をして関数 Y を導入する。

$$r = y^2, R_l(r) = y^{-3/2}Y_l(y)$$

次の固有値方程式に帰着する。

$$\left(\frac{d^2}{dy^2} + \frac{-\frac{3}{4} - 4l(l+1)}{y^2} + 8E\frac{m_e}{\hbar^2}y^2 + 8Z\frac{m_e}{\hbar^2}\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\right)Y_l(y) = 0$$

基底Ki (i=0,1,2) からなるリー代数 su(1,1) を考える。つぎの関係が成立する。

$$
\begin{aligned}
[K_1, K_2] &= -iK_0 \\
[K_0, K_1] &= iK_2 \\
[K_2, K_0] &= iK_1
\end{aligned}
$$

このとき、カシミール演算子 C が存在する。

$$C = K_0^2 - K_1^2 - K_2^2$$

su(1,1) 代数の既約表現は C の固有値によって定まる。

C、K0の同時固有状態として既約表現を記述できる。（k>0実数、m'>=0非負整数）

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

既約表現空間内の各固有ベクトルは、昇降演算子で結びついている。

$$K_\pm = K_1 \pm iK_2$$

$$K_-|k, 0\rangle = 0 \qquad |k, m'\rangle = \sqrt{\frac{\Gamma(2k)}{m'!\Gamma(2k+m')}}\,(K_+)^{m'}\,|k, 0\rangle$$

次の微分を含む演算子は su(1,1) 代数の基底となる。

$$
\begin{aligned}
K_0 &= \frac{d^2}{dy^2} + \frac{a}{y^2} - \frac{y^2}{16} \\
K_1 &= \frac{d^2}{dy^2} + \frac{a}{y^2} + \frac{y^2}{16} \\
K_2 &= \frac{-i}{2}\left(y\frac{d}{dy} + \frac{1}{2}\right)
\end{aligned}
$$

Yに関する固有値方程式は次のように書ける。

$$
(uK_0 + c)\, e^{i\theta K_2} Y_l(y) = 0
$$

すなわち Y は K0 の固有ベクトルを既約表現空間内で回転したものである。

ただし以下のパラメータを導入している。

$$
a = -\frac{3}{4} - 4l(l+1),\ b = 8E\frac{m_e}{\hbar^2} < 0,\ c = 8Z\frac{m_e}{\hbar^2}\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} > 0
$$

$$
u = -\sqrt{-16b},\ \cosh(\theta) = -\frac{1}{u}\left(\frac{1}{2} - 8b\right),\ \sinh(\theta) = -\frac{1}{u}\left(\frac{1}{2} + 8b\right)
$$

カシミール演算子はスカラーとなる。

$$C = K_0^2 - K_1^2 - K_2^2 = l(l+1)$$

したがって Y は n>=l+1 として次のように書くことが出来る。

$$Y_{nl} = e^{-i\theta K_2}|l+1, n-(l+1)\rangle$$

固有値方程式は以下のように書かれる。

$$\begin{aligned} K_0|l+1, n-(l+1)\rangle &= \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0}\sqrt{\frac{m_e/\hbar^2}{-2E_n}}|l+1, n-(l+1)\rangle \\ &= n|l+1, n-(l+1)\rangle \end{aligned}$$

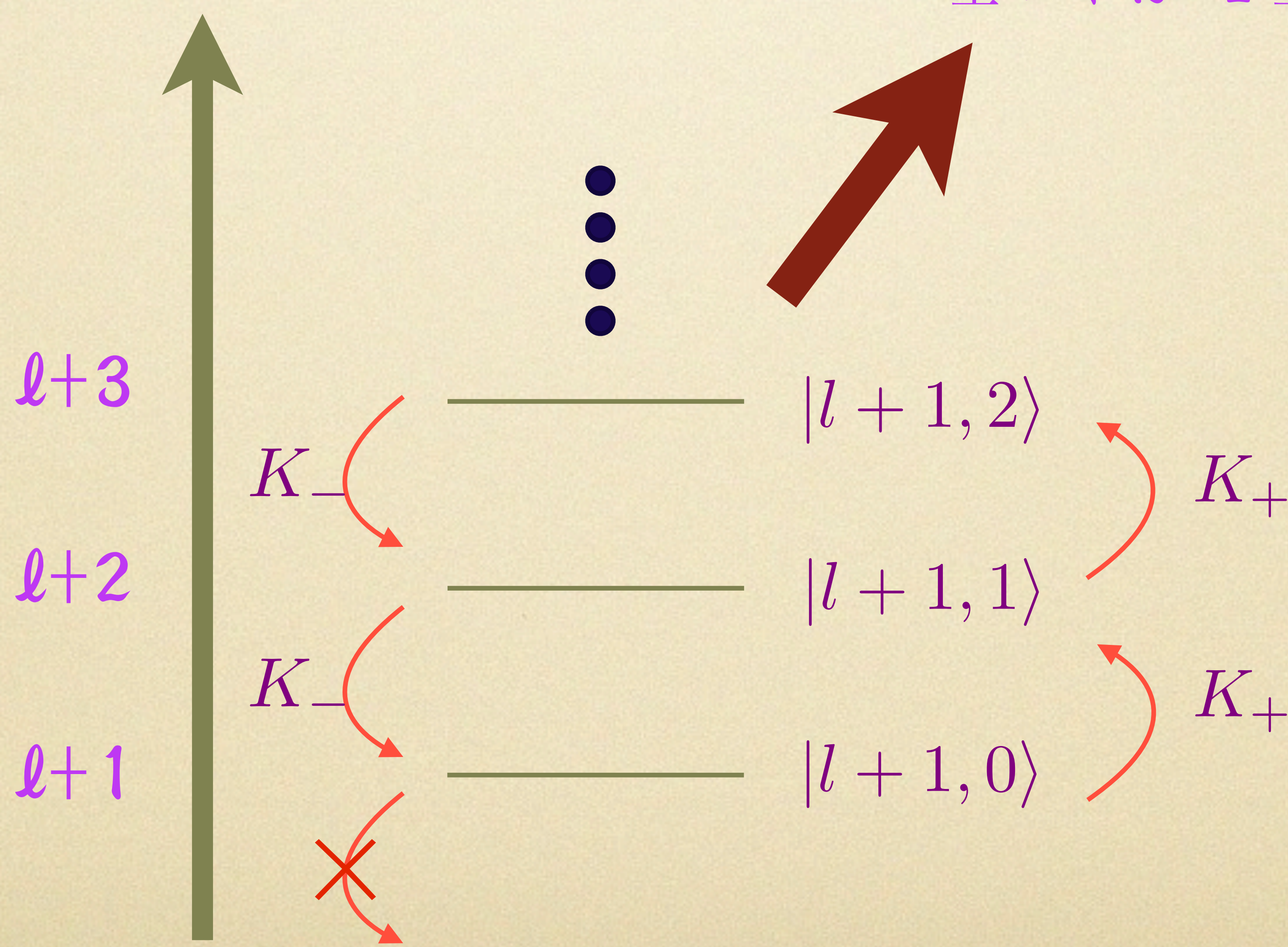
エネルギーは上記の方程式より求まる。

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

su(1,1)×so(3) の既約表現空間は 角運動量量子数 ℓ となるエネルギー固有状態からなるヒルベルト空間である。

下記の全状態が同一既約表現に属する。
下記の各準位はso(3)対称性に基づく 2ℓ+1 重縮退となる。

$$n = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0}\sqrt{\frac{m_e/\hbar^2}{-2E_n}}$$



全束縛状態は角運動量量子数で分類される。

$$n = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0}\sqrt{\frac{m_e/\hbar^2}{-2E_n}}$$

各線が 2ℓ+1 重縮退となっている。
ℓ で指定された各部分空間は su(1,1) ×so(3)
の既約表現空間となっている。