水素原子の束縛状態
と
$SO(4,2)$ 群の代数構造

adhara*

2016 年 12 月 27 日⛄

概要

水素原子の束縛状態を記述する Jordan-Schwinger のボソン演算子を用いてリー代数 $so(4,2)$ を構成できることを示す。

* Twitter @adhara_mathphys

目次

1　はじめに

本節では問題設定について記す。以下ではアインシュタインの縮約表記を用い、$\hbar = 1$ とする。

1.1　ハミルトニアンと考えているヒルベルト空間

水素原子のハミルトニアンを

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

に対して Schrödinger 方程式

$$H\Psi = E\Psi \tag{2}$$

の全束縛状態のなすヒルベルト空間 $\mathcal{H}_b$ について考えている（束縛状態は $E < 0$ となるエネルギー固有状態）。

1.2　Jordan-Schwinger のボソン演算子を用いた束縛状態の表現

水素原子の束縛状態波動関数は四種類のボソン生成演算子を用いることで表現できる。すなわち l を非負の整数あるい

は半整数として、

$$\Psi_{l,m_x} \otimes \Psi_{l,m_y} = \frac{(a_1^\dagger)^{l-m_x}(a_2^\dagger)^{l+m_x}(b_1^\dagger)^{l-m_y}(b_2^\dagger)^{l+m_y}}{\sqrt{(l-m_x)!(l+m_x)!(l-m_y)!(l+m_y)!}}\Psi_0 \tag{3}$$

によってエネルギーが

$$E = -\frac{1}{2(2l+1)^2} m_e \kappa^2 \tag{4}$$

となりかつ正規直交化された束縛状態を表示できる。（ただし、$m_x, m_y = -l, -l+1, \cdots l-1, l$）すなわち、$\mathcal{H}_b$ の完全正規直交基底となる。

1.3　力学的対称群 $SO(4)$ が存在すること

角運動量ベクトルは、

$$L_i = \epsilon_{ijk} x_j p_k \tag{5}$$

で定義される。

Laplace-Runge-Lenz（LRL）ベクトルは

$$\boldsymbol{M} = \frac{1}{2m_e}(\boldsymbol{p} \times \boldsymbol{L} - \boldsymbol{L} \times \boldsymbol{p}) - \frac{\kappa}{r}\boldsymbol{x} \tag{6}$$

で定義される。（$|\boldsymbol{x}| = r$ としている。）

エネルギー固有値 E を一つ固定したときに、縮退した束縛状態全体からなる部分ヒルベルト空間に演算子の作用を限定したときは規格化 LRL ベクトル

$$\tilde{\boldsymbol{M}} = \boldsymbol{M}\sqrt{\frac{-m_e}{2E}} \tag{7}$$

を導入することができて、L_i, M_i $(i = 1, 2, 3)$ の計 6 演算子は $so(4)$ 代数の基底となる。すなわち、

$$L_i = \frac{1}{2} L_{jk}\epsilon_{ijk} \tag{8}$$

$$\tilde{M}_i = L_{i4} \tag{9}$$

とすると（ただし $k, l = 1, 2, 3, 4$ に対して $L_{kl} = -L_{lk}$ とする)、

$$[L_{ij}, L_{kl}] = i\left(g_{ik}L_{jl} - g_{il}L_{jk} - g_{ik}L_{il} + g_{jl}L_{ik}\right) \tag{10}$$

が成立している。ただし計量行列

$$g = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{11}$$

を導入した。

■ボソン演算子による表示

ボソン演算子を用いると

$$L_i = \frac{1}{2} L_{jk} \epsilon_{ijk} = \frac{1}{2} \left(A^\dagger \tilde{\sigma}_i A + B^\dagger \tilde{\sigma}_i B \right) \tag{12}$$

$$\tilde{M}_i = L_{i4} = \frac{1}{2} \left(A^\dagger \tilde{\sigma}_i A - B^\dagger \tilde{\sigma}_i B \right) \tag{13}$$

となっている。

ただしパウリ行列

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

を用いて、

$$\tilde{\sigma}_i = \sigma_2 \sigma_i \sigma_2 \tag{14}$$

を導入した。また、

$$A = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} \tag{15}$$

$$A^\dagger = \begin{pmatrix} a_1^\dagger & a_2^\dagger \end{pmatrix} \tag{16}$$

$$B = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix} \tag{17}$$

$$B^\dagger = \begin{pmatrix} b_1^\dagger & b_2^\dagger \end{pmatrix} \tag{18}$$

とした。

1.4　やりたいこと

力学的対称群 $SO(4)$ はエネルギー縮退を良く説明することが出来る。すなわち、同一エネルギーを持つ固有状態間を変換するエルミート線形演算子が $SO(4)$ の表現そのものだということである。この場合のエルミート線形演算子とは角運動量や LRL ベクトルであった。

一方で、群 $SO(4)$ は異なるエネルギーを持つ固有状態を変換する線形演算子は $SO(4)$ の表現ではない。すなわち、$SO(4)$ の表現論では異なる固有状態間の関係を論じることはできない。これを行うためにはエネルギー準位を上げ下げするような演算子を含んだリー代数を構成し、全束縛状態固有状態の成す部分ヒルベルト空間がその既約部分空間となるようなことが必要である。

ただしエネルギー準位を上げ下げすることができるすべての演算子を含んだリー代数は無限次元リー代数となるであろう。すなわち、ボソン生成演算子の積をとることで作られる無数のエネルギーの昇降演算子が無限次元リー代数をなす。

しかしながら、そのようなものを考える前に全束縛状態固有状態の成す部分ヒルベルト空間がその既約部分空間を構成することも可能である。すなわち、エネルギー準位を一つ分だけ昇降する演算子を含んだリー代数が、その役割を果たす

ことができるのである。このような一つ分だけエネルギー準位を昇降する演算子というものは、すべてのエネルギー昇降演算子の生成子（積によってすべてのエネルギー昇降演算子構成できるという意味）であるという点で基本的なものである。これをスペクトル生成演算子と呼ぶ。

本ノートでは角運動量、LRL ベクトル、エルミート化スペクトル生成演算子（後述）、エネルギー指標演算子（後述）が閉じた（有限次元の）リー代数を構成し、それが $so(4,2)$ であることを示す。

2　スペクトル生成演算子

ボソン演算子の波動関数の形 3 とボソン生成演算子の作用の仕方

$$
\begin{aligned}
a_1^\dagger\left(\Psi_{l,m_x}\otimes\Psi_{l,m_y}\right) &= \sqrt{l-m_x+1}\ \Psi_{l+\frac{1}{2},m_x-\frac{1}{2}}\otimes\Psi_{l,m_y}\\
a_2^\dagger\left(\Psi_{l,m_x}\otimes\Psi_{l,m_y}\right) &= \sqrt{l+m_x+1}\ \Psi_{l+\frac{1}{2},m_x+\frac{1}{2}}\otimes\Psi_{l,m_y}\\
b_1^\dagger\left(\Psi_{l,m_x}\otimes\Psi_{l,m_y}\right) &= \sqrt{l-m_y+1}\ \Psi_{l,m_x}\otimes\Psi_{l+\frac{1}{2},m_y-\frac{1}{2}}\\
b_2^\dagger\left(\Psi_{l,m_x}\otimes\Psi_{l,m_y}\right) &= \sqrt{l+m_y+1}\ \Psi_{l,m_x}\otimes\Psi_{l+\frac{1}{2},m_y+\frac{1}{2}}
\end{aligned}
\tag{19}
$$

を見ると、

$$
a_1^\dagger b_1^\dagger, a_1^\dagger b_2^\dagger, a_2^\dagger b_1^\dagger, a_2^\dagger b_2^\dagger
$$

は固有状態を一つ上のエネルギー準位に変換することのできる演算子であることがわかる。

一方でで一つ下のエネルギー準位に固有状態を変化することのできる演算子は、

$$a_1b_1, a_1b_2, a_2b_1, a_2b_2$$

である。

これら 8 個の演算子をスペクトル生成演算子と呼ぶ。これらの複素係数線形結合により（実ベクトルとして）16 個の独立な演算子を作ることが可能であるが、エルミート性を課した場合は 8 個の独立した演算子を作ることが可能である。これらをエルミート化スペクトル生成演算子と呼ぶ。

3　リー群 $SO(4,2)$ とリー代数 $so(4,2)$

3.1　局所同型な 3 つのリー群

■$O(4,2)$

6 次元実ベクトル空間 $\boldsymbol{R}^6$ を考える。計量行列 g を

$$g = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{20}$$

として、g によって定まる非正定値非退化対称双線形形式、

$$(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})_g=(\boldsymbol{x},g\boldsymbol{y}) \tag{21}$$

を保つ[*1]線形代数群を $O(4,2)$ という。[*2]したがって、

$$\begin{aligned}O(4,2)&=\left\{A\in GL(6,\boldsymbol{R})|\forall\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}\in\boldsymbol{R}^6:(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})_g=(A\boldsymbol{x},A\boldsymbol{y})_g\right\}\\&=\left\{A\in GL(6,\boldsymbol{R})|g=A^TgA\right\}\\&=\left\{A\in GL(6,\boldsymbol{R})|gA^{-1}g=A^T\right\}\end{aligned} \tag{22}$$

であり、$A\in O(4,2)$ ならば $\det A=\pm1$ であることがわかる。

■$SO(4,2)$

群 $O(4,2)$ のうち行列式が 1 となる部分群を $SO(4,2)$ と書く。すなわち、indefinite な特殊直交群と呼ばれる。ここで

$$O(4,2)/SO(4,2)\simeq Z_2$$

となる。

■$SO^+(4,2)$

実は群 $SO(4,2)$ は位相空間としては連結ではない。直交群 $O(n)$ に対して特殊直交群 $SO(n)$ が連結であることと対照的

[*1] $(\cdot,\cdot)$ は $(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})=\sum_{i=1}^{6}x_iy_i$ で定義される内積を表す。

[*2] 同様に $p,q\in\boldsymbol{Z}_+$ として $O(p,q)$ を定義できる。これらの群は Indefinite な直交群と呼ばれる

である。群 $SO(4,2)$ のうち単位元を含む連結成分は部分群を成す。これを $SO^+(4,2)$ と書く。ここで

$$SO(4,2)/SO^+(4,2) \simeq Z_2$$

となる。

■三つの群の関係

以上より、$SO(4,2)$ は連結成分二つであり、$O(4,2)$ は連結性分四つということになる。

3.2 $SO^+(4,2)$ の生成演算子とリー代数 $so(4,2)$

リー群 $SO(4,2)$ の次元（実多様体としての次元）は ${}_6C_4 = 15$ である。対応するリー代数 $so(4,2)$ の次元も 15 である。すなわち、独立な 15 個の演算子が基底となるはずである。

6×6 行列 $L_{ab}, L_{a\mu}, L_{\mu,\nu}$ （$a,b = 1,2,3,4$、$\mu,\nu = 5,6$ は行列の脚ではない）を

$$(L_{ij})_{kl} = i\left(-\delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{il}\delta_{jk}\right) \tag{23}$$

$$(L_{i\mu})_{kl} = i\left(\delta_{ik}\delta_{\mu l} + \delta_{il}\delta_{bk}\right) \tag{24}$$

$$(L_{\mu i})_{kl} = -i\left(\delta_{ik}\delta_{\mu l} + \delta_{il}\delta_{bk}\right) \tag{25}$$

$$(L_{\mu\nu})_{kl} = i\left(\delta_{\mu k}\delta_{\nu l} - \delta_{\mu l}\delta_{\nu k}\right) \tag{26}$$

によって定義する。このとき $i,j = 1,2,\cdots,6$ に対して、$L_{ij} = -L_{ji}$ であり $6 \times 6 = 36$ 個の行列の中で（実ベクトルと

して）線形独立なものは 15 個である。

これらの 15 個の行列は $SO^+(4,2)$ の生成元となっている。すなわち、

$$SO^+(4,2) = \left\{ \exp\left(-i \sum_{1\le i<j\le 6} x_{ij} L_{ij} \right) \middle| x_{ij} \in \boldsymbol{R} \right\} \tag{27}$$

となっている。

これらの生成元同士の交換子を取ると、

$$[L_{ij}, L_{kl}] = i\left(g_{ik}L_{jl} - g_{il}L_{jk} - g_{ik}L_{il} + g_{jl}L_{ik}\right) \tag{28}$$

が成立する。[*3]この独立な 15 個の行列から生成される代数は実リー代数となる。これとリー代数として同型となるものを総称して $so(4,2)$ 代数と呼ぶ。

4 $so(4,2)$ 代数の構築

4.1 考え方

$so(4)$ 代数の基底となっている 6 つの演算子

$$L_i = \frac{1}{2} L_{jk}\epsilon_{ijk} = \frac{1}{2}\left(A^\dagger \tilde{\sigma}_i A + B^\dagger \tilde{\sigma}_i B\right) \tag{29}$$

$$\tilde{M}_i = L_{i4} = \frac{1}{2}\left(A^\dagger \tilde{\sigma}_i A - B^\dagger \tilde{\sigma}_i B\right) \tag{30}$$

*3 実は 36 個の行列について成立している。

と、スペクトル生成演算子

$$a_1^\dagger b_1^\dagger, a_1^\dagger b_2^\dagger, a_2^\dagger b_1^\dagger, a_2^\dagger b_2^\dagger, a_1 b_1, a_1 b_2, a_2 b_1, a_2 b_2$$

から作られる 8 つのエルミート化スペクトル生成演算子の計 14 個の線形独立なエルミート演算子から閉じたリー代数を構成することを考える。

これらの線形結合をとったものの交換子演算の結果は、複素数と

$$\begin{gathered} a_1^\dagger b_1^\dagger, a_1^\dagger b_2^\dagger, a_2^\dagger b_1^\dagger, a_2^\dagger b_2^\dagger, a_1 b_1, a_1 b_2, a_2 b_1, a_2 b_2, \\ a_1^\dagger a_1, a_1^\dagger a_2, a_2^\dagger a_1, a_2^\dagger a_2, b_1^\dagger b_1, b_1^\dagger b_2, b_2^\dagger b_1, b_2^\dagger b_2 \end{gathered}$$

の線形結合となる。ただし演算結果のうち

$$a_1^\dagger a_1, a_2^\dagger a_2, , b_1^\dagger b_1, b_2^\dagger b_2 \tag{31}$$

の同類項をまとめたときに、

$$a_1^\dagger a_1 + a_2^\dagger a_2 - b_1^\dagger b_1 - b_2^\dagger b_2 = A^\dagger A - B^\dagger B$$

の項が出てこないことだけは言える。[*4]演算子リスト 31 の線形結合から作られる独立な 16 個のエルミート演算子のうち、14 個はエルミート化スペクトル生成演算子と so(4) 代数を構

[*4] 付録の有用な式からわかる。ちなみに $A^\dagger A - B^\dagger B$ をヒルベルト空間 $\mathcal{H}_b$ に作用させると 0 になり、0 演算子であることもわかる。

成する演算子で、1 個は交換子中に登場し得ない $A^\dagger A - B^\dagger B$ である。登場し得る残りの独立な演算子は、

$$a_1^\dagger a_1 + a_2^\dagger a_2 + b_1^\dagger b_1 + b_2^\dagger b_2 = A^\dagger A + B^\dagger B$$

である。

4.2 $so(4,2)$ の基底

so(4) 代数を構成する演算子 $L_{23}, L_{12}, L_{23}, L_{14}, L_{24}, L_{34}$ は、

$$[L_{ij}, L_{kl}] = i\left(g_{ik}L_{jl} - g_{il}L_{jk} - g_{ik}L_{il} + g_{jl}L_{ik}\right) \quad (32)$$

を満たす。

さらにエルミート化演算子 8 つを

$$L_{15} = \frac{i}{2}\left(a_1^\dagger b_1^\dagger - a_2^\dagger b_2^\dagger\right) + \mathrm{h.c.} \tag{33}$$

$$L_{16} = -\frac{1}{2}\left(a_1^\dagger b_1^\dagger - a_2^\dagger b_2^\dagger\right) + \mathrm{h.c.} \tag{34}$$

$$L_{25} = -\frac{1}{2}\left(a_1^\dagger b_1^\dagger + a_2^\dagger b_2^\dagger\right) + \mathrm{h.c.} \tag{35}$$

$$L_{26} = -\frac{i}{2}\left(a_1^\dagger b_1^\dagger + a_2^\dagger b_2^\dagger\right) + \mathrm{h.c.} \tag{36}$$

$$L_{35} = -\frac{i}{2}\left(a_1^\dagger b_2^\dagger + a_2^\dagger b_1^\dagger\right) + \mathrm{h.c.} \tag{37}$$

$$L_{36} = \frac{1}{2}\left(a_1^\dagger b_2^\dagger + a_2^\dagger b_1^\dagger\right) + \mathrm{h.c.} \tag{38}$$

$$L_{45} = \frac{1}{2}\left(a_1^\dagger b_2^\dagger - a_2^\dagger b_1^\dagger\right) + \mathrm{h.c.} \tag{39}$$

$$L_{46} = \frac{i}{2}\left(a_1^\dagger b_2^\dagger - a_2^\dagger b_1^\dagger\right) + \mathrm{h.c.} \tag{40}$$

のように定義すると、（ただし、h.c はエルミート共役を表す）

$$L_{56} = \frac{1}{2}\left(A^\dagger A + B^\dagger B + 2\right) \tag{41}$$

としたうえで、式 32 が全ての index で成立することが分かる。

$[L_{a\mu}, L_{b\nu}]$ $(a, b = 1, 2, 3, 4、\mu, \nu = 5, 6)$ については、付録の有用な式を使えば確認可能である。その他についても若干な計算で確認可能である。[*5]

[*5] 加筆するかも知れない。

最後に

$$L_{56} = \frac{1}{2}\left(A^\dagger A + B^\dagger B + 2\right)$$

についてコメントする。

$$L_{56}\Psi_{l,m_x}\otimes\Psi_{l,m_y} = (2l+1)\Psi_{l,m_x}\otimes\Psi_{l,m_y} \tag{42}$$

これはエネルギーの指標である主量子数に他ならない。このことからこの演算子をエネルギー指標演算子と呼ぶことにする。

付録 A　有用な式

$$\begin{aligned}
&\left[\left(\alpha a_1^\dagger b_1^\dagger + \beta a_2^\dagger b_2^\dagger + \mathrm{h.c}\right), \left(\gamma a_1^\dagger b_1^\dagger + \delta a_2^\dagger b_2^\dagger + \mathrm{h.c}\right)\right] \\
&= (\alpha\gamma^* - \alpha^*\gamma)\left[a_1^\dagger b_1^\dagger, a_1 b_1\right] \\
&+ (\beta\delta^* - \beta^*\delta)\left[a_2^\dagger b_2^\dagger, a_2 b_2\right] \\
&= 2\mathrm{Im}\left(\alpha\gamma^*\right) i\left(-1 - a_1^\dagger a_1 - b_1^\dagger b_1\right) \\
&+ 2\mathrm{Im}\left(\beta\delta^*\right) i\left(-1 - a_2^\dagger a_2 - b_2^\dagger b_2\right)
\end{aligned} \tag{43}$$

$$
\begin{aligned}
&\left[\left(\alpha a_1^\dagger b_2^\dagger + \beta a_2^\dagger b_1^\dagger + \mathrm{h.c}\right), \left(\gamma a_1^\dagger b_2^\dagger + \delta a_2^\dagger b_1^\dagger + \mathrm{h.c}\right)\right] \\
&= \left(\alpha\gamma^* - \alpha^*\gamma\right)\left[a_1^\dagger b_2^\dagger, a_1 b_2\right] \\
&+ \left(\beta\delta^* - \beta^*\delta\right)\left[a_2^\dagger b_1^\dagger, a_2 b_1\right] \\
&= 2\mathrm{Im}\left(\alpha\gamma^*\right) i\left(-1 - a_1^\dagger a_1 - b_2^\dagger b_2\right) \\
&+ 2\mathrm{Im}\left(\beta\delta^*\right) i\left(-1 - a_2^\dagger a_2 - b_1^\dagger b_1\right)
\end{aligned}
\tag{44}
$$

$$
\begin{aligned}
&\left[\left(\alpha a_1^\dagger b_1^\dagger + \beta a_2^\dagger b_2^\dagger + \mathrm{h.c}\right), \left(\gamma a_1^\dagger b_2^\dagger + \delta a_2^\dagger b_1^\dagger + \mathrm{h.c}\right)\right] \\
&= \left(\alpha\gamma^* - \alpha^*\gamma\right)\left[a_1^\dagger b_1^\dagger, a_1 b_2\right] \\
&+ \left(\alpha\delta^* - \alpha^*\delta\right)\left[a_1^\dagger b_1^\dagger, a_2 b_1\right] \\
&+ \left(\beta\gamma^* - \beta^*\gamma\right)\left[a_2^\dagger b_2^\dagger, a_1 b_2\right] \\
&+ \left(\beta\delta^* - \beta^*\delta\right)\left[a_2^\dagger b_2^\dagger, a_2 b_1\right] \\
&= -2\mathrm{Im}\left(\alpha\gamma^*\right) i b_1^\dagger b_2 - 2\mathrm{Im}\left(\alpha\delta^*\right) i a_1^\dagger a_2 \\
&\quad -2\mathrm{Im}\left(\beta\gamma^*\right) i a_2^\dagger a_1 - 2\mathrm{Im}\left(\beta\delta^*\right) i b_2^\dagger b_1
\end{aligned}
\tag{45}
$$