Kustaanheimo–Stiefel 変換

（その４）Schrödinger 方程式を代数的手法により解く

adhara*

2021 年 5 月 5 日

概要

本ノートでは非相対論的水素原子の Schrödinger 方程式を Kustaanheimo–Stiefel 変換によって四次元空間中の調和振動子の量子力学的問題に書き換えた方程式を 2 種類の代数的手法により解いた．

目次

* Twitter @adhara_mathphys

1 Kustaanheimo–Stiefel 変換による方程式の書き換え

1.1 問題設定

非相対論的水素様原子に対する Schrödinger 方程式,

$$H\Psi(\boldsymbol{r}) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m_e}\nabla^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\frac{Z}{r}\right]\Psi(\boldsymbol{r}) = E\Psi(\boldsymbol{r}) \tag{1}$$

から束縛状態のスペクトルと波動関数を求めることを考える．すなわち，式 1 においては $E<0$ の解を求めるものとする．

簡単のために幾分の規格化を行っておく．すなわち，

$$\begin{cases} \frac{8m_eE}{\hbar^2} = -\alpha^4,\ \alpha > 0 \\ \lambda = \frac{8m_e}{\hbar^2}\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \end{cases}$$

とおくと，

$$\left(4\nabla^2 + \frac{\lambda}{r} - \alpha^4\right)\Psi(\boldsymbol{r}) = 0 \tag{2}$$

と書き換えられる．

1.2 Kustaanheimo–Stiefel 変換の導入

Kustaanheimo–Stiefel 変換は

$$\Phi_{KS} : \mathbb{R}^3 \times S^1 \to \mathbb{C}^2 : (x,y,z,\sigma) \mapsto (\xi_a, \xi_b) \tag{3}$$

$$\xi_a = \sqrt{r}\cos\left(\frac{\theta}{2}\right)e^{\mathrm{i}(\sigma+\phi)/2} \tag{4}$$

$$\xi_b = \sqrt{r}\sin\left(\frac{\theta}{2}\right)e^{\mathrm{i}(\sigma-\phi)/2} \tag{5}$$

で与える．ただし上記の変換 5 では変換前の座標としては極座標を考えている．

$$(x,y,z) = (r\sin\theta\cos\phi, r\sin\theta\sin\phi, r\cos\theta)$$

$$(r \geq 0, 0 \leq \theta \leq \pi, 0 \leq \phi < 2\pi)$$

また，

$$0 \leq \sigma < 4\pi$$

である．この写像はほぼ[*1]一対一対応となっている．

$$x + \mathrm{i}y = 2\xi_a\bar{\xi}_b, z = \xi_a\bar{\xi}_a - \xi_b\bar{\xi}_b \tag{6}$$

[*1] 極点を除けば

の関係にある．

この変換を用いると

Schrödinger 方程式 2 は

$$\left(\frac{\partial}{\partial\xi_a}\frac{\partial}{\partial\bar{\xi}_a}+\frac{\partial}{\partial\xi_b}\frac{\partial}{\partial\bar{\xi}_b}+\lambda-\alpha^4(\xi_a\bar{\xi}_a+\xi_b\bar{\xi}_b)\right)\Psi(\xi_a,\bar{\xi}_a,\xi_b,\bar{\xi}_b)=0 \tag{7}$$

と変形できる．また波動関数が σ を変数として含まないことから，

$$\left(\xi_a\frac{\partial}{\partial\xi_a}-\bar{\xi}_a\frac{\partial}{\partial\bar{\xi}_a}+\xi_b\frac{\partial}{\partial\xi_b}-\bar{\xi}_b\frac{\partial}{\partial\bar{\xi}_b}\right)\Psi(\xi_a,\bar{\xi}_a,\xi_b,\bar{\xi}_b)=0 \tag{8}$$

という拘束条件を表す偏微分方程式が成立する．

1.3　四次元空間中の調和振動子の問題への変換

さらに四次元空間中の調和振動子の問題へ書き換えることも可能である．変数変換

$$\begin{cases}\xi_a=\alpha(q_1+\mathrm{i}q_2)\\ \xi_b=\alpha(q_3+\mathrm{i}q_4)\end{cases}$$

を用いると（ただし $(q_1,q_2,q_3,q_4)\in\mathbb{R}^4$），式 7 は

$$\mathcal{H}\Psi(q_1,q_2,q_3,q_4)=\epsilon\Psi(q_1,q_2,q_3,q_4) \tag{9}$$

となり，式 8 は

$$(L_{12}+L_{34})\,\Psi(q_1,q_2,q_3,q_4)=0 \tag{10}$$

となる．[*2] 但し，

$$\epsilon=\frac{\lambda}{\alpha^2}, \tag{11}$$

$$\mathcal{H}=-\left(\frac{\partial}{\partial q_1^2}+\frac{\partial}{\partial q_2^2}+\frac{\partial}{\partial q_3^2}+\frac{\partial}{\partial q_4^2}\right)+\left(q_1^2+q_2^2+q_3^2+q_4^2\right)=-\Delta_{\mathbb{R}^4}+q^2 \tag{12}$$

$$L_{ij}=\frac{1}{\mathrm{i}}\left(q_i\frac{\partial}{\partial q_j}-q_j\frac{\partial}{\partial q_i}\right) \tag{13}$$

である．式 9 は四次元空間中の等方調和振動子の Schrödinger 方程式に他ならない．式 10 は四次元空間における角運動量に関する拘束条件が課せられていることに相当する．t 式 9 と式 10 を連立させて解くことで，水素原子の束縛状態のスペクトルと波動関数を求めることを考える．

[*2] $L_{12}=\frac{1}{\mathrm{i}}\left(\frac{\partial}{\partial\sigma}+\frac{\partial}{\partial\phi}\right)$，$L_{34}=\frac{1}{\mathrm{i}}\left(\frac{\partial}{\partial\sigma}-\frac{\partial}{\partial\phi}\right)$ より $(L_{12}+L_{34})\propto\frac{\partial}{\partial\sigma}$ となり，式 10 は Ψ が σ に依存しないことを保証する式となっている．

1.4 ボソン演算子の導入

ボソン演算子

$$a_i = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(q_i + \frac{\partial}{\partial q_i}\right), a_i^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(q_i - \frac{\partial}{\partial q_i}\right) \tag{14}$$

を導入すると，ボソン演算子間の交換関係

$$\left[a_i, a_j^\dagger\right] = \delta_{ij},\ [a_i, a_j] = \left[a_i^\dagger, a_j^\dagger\right] = 0 \tag{15}$$

を満たすことがわかる．ここで，

$$N_i = a_i^\dagger a_i,\ \mathcal{N} = N_1 + N_2 + N_3 + N_4 \tag{16}$$

·とおくと，

$$\mathcal{H} = 2\mathcal{N} + 4 \tag{17}$$

と書くことができる．

1.5 式 9 の対称性

角運動量演算子はボソン演算子を用いると

$$L_{ij} = -\mathrm{i}\left(a_i^\dagger a_j - a_j^\dagger a_i\right) \tag{18}$$

と表せる．

ここで，

$$[a_i^\dagger a_j, a_k^\dagger a_l] = \delta_{jk} a_i^\dagger a_l - \delta_{il} a_k^\dagger a_j \tag{19}$$

であることから，$a_i^\dagger a_j, 1 \leq i,j \leq 4$ たちは Lie 代数をなす．一方で，(i,j) 成分のみ 1 で他の要素は 0 の 4×4 行列 E_{ij} を考えると，

$$[E_{ij}, E_{kl}] = \delta_{jk} E_{il} - \delta_{il} E_{kj} \tag{20}$$

$E_{ij}, 1 \leq i,j \leq 4$ たちは Lie 代数をなし，$a_i^\dagger a_j, 1 \leq i,j \leq 4$ がなす Lie 代数と同型である．

また，

$$S_{ij} = \left(a_i^\dagger a_j + a_j^\dagger a_i\right) \tag{21}$$

という演算子を導入しておくと，L_{ij}, S_{ij}, N_i はエルミート行列とみなすことができる．特に，$\mathrm{i}L_{ij}, \mathrm{i}S_{ij}, (i < j), \mathrm{i}N_i$ の 16 演算子がなす Lie 代数は線形独立な 4×4 行列の反エルミート行列がなす Lie 代数と同型であることがわかる．すなわち，これらは実 Lie 代数 $\mathfrak{u}(4)$ の基底である．

さらに，

$$N_{ij} = 2(N_i + N_j) - \mathcal{N} \tag{22}$$

とおくと，$\mathrm{i}L_{ij}, \mathrm{i}S_{ij}, (i < j), \mathrm{i}N_{12}, \mathrm{i}N_{13}, \mathrm{i}N_{14}$ の 15 演算子がなす Lie 代数は線形独立なトレース 0 の 4×4 行列の反エルミート行列がなす Lie 代数と同型であることがわかる．すなわち，これらは実 Lie

代数 $\mathfrak{su}(4)$ の基底である．単純 Lie 代数 $\mathfrak{su}(4)$ の階数は 3 なので，Cartan 部分代数の次元は 3 となる．例えば，$\mathrm{i}L_{12}$，$\mathrm{i}L_{34}$，$\mathrm{i}N_{12}$ の線型結合がなす部分代数は Cartan 部分代数となる．また，$\mathcal{N}$ あるいは $\mathcal{H}$ は上記 Lie 代数の元と全て可換である（Casimir 演算子）ことから，$\mathfrak{su}(4)$ を式 9 の対称性を記述する Lie 代数であると考える．

1.6　二通りの解法

Lie 代数 $\mathfrak{su}(4)$ は Lie 群 SU(4) を生成する．偏微分方程式を解くための強力な手法として変数分離があるが，表現論の言葉を使うと，変数分離とは群の既約表現を部分群の既約表現へ分解していくことに相当する．どのような部分群を使うによって，変数分離の仕方が異なる．

本ノートでは

- 部分群列 $\mathrm{SU}(4) \supset \mathrm{SO}(4) \supset \mathrm{SO}(2) \times \mathrm{SO}(2)$ への分解を考える方法
- 部分群列 $\mathrm{SU}(4) \supset \mathrm{SU}(2) \otimes \mathrm{SU}(2) \supset \mathrm{SO}(2) \times \mathrm{SO}(2)$ への分解を考える方法

の二つの方法について紹介する．

解法は次のような流れになる．

式 9 の対称性が SU(4) であることから，式 9 において固有値（エネルギー）を同じくする固有状態たちがなす空間は，SU(4) の一つの既約表現に属すると考えることができる．即ち，エネルギーが異なる空間を SU(4) の Casimir 演算子 $\mathcal{H}$ で分類することが出来る．[*3]

次に $\mathcal{N}$ で分類された既約表現を SO(4) あるいは $\mathrm{SU}(2) \otimes \mathrm{SU}(2)$ の既約表現に分解することを考える．部分群が SO(4) である場合は $\Delta_{S^3} = -\left(L_{12}^2 + L_{23}^2 + L_{31}^2 + L_{14}^2 + L_{24}^2 + L_{34}^2\right)$ を Casimir 演算子できる．部分群が $\mathrm{SU}(2) \otimes \mathrm{SU}(2)$ である場合は $N_1 + N_2$ を Casimir 演算子できる．部分群における Casimir 演算子を用いて SU(4) の既約表現に属する表現空間を分解することができる．[*4]

最後に両手法では可換な演算子 L_{12}, L_{34} から生成される，可換部分群 $\mathrm{SO}(2) \times \mathrm{SO}(2)$ を用いて，さらに既約表現を分類できる．これは L_{12}, L_{34} の同時固有状態で分類することに相当する．しかしながら，式 10 の拘束条件が存在するので，L_{12} と L_{34} は独立では無くなる．従って，L_{12} のみで分類することになる．

まとめると，それぞれの手法は，

- 互いに可換で独立な $\mathcal{H}$，Δ_{S^3}，L_{12} を同時対角化する手法．
  但しそれぞれ $\mathrm{SU}(4), \mathrm{SO}(4), \mathrm{SO}(2) \times \mathrm{SO}(2)$ の Casimir 演算子となっている．
- 互いに可換で独立な $\mathcal{H}$，$N_1 + N_2$，L_{12} を同時対角化する手法．
  但しそれぞれ $\mathrm{SU}(4), \mathrm{SU}(2) \otimes \mathrm{SU}(2), \mathrm{SO}(2) \times \mathrm{SO}(2)$ の Casimir 演算子となっている．

ということである．

[*3] SU(4) は階数 3 の Lie 群なので独立な Casimir 演算子は一般には 3 つあるが，今回の問題に関しては縮退して 1 つになる．

[*4] SO(4)，$\mathrm{SU}(2) \otimes \mathrm{SU}(2)$ は階数 3 の Lie 群なので独立な Casimir 演算子は一般には 3 つあるが，今回の問題に関しては縮退して 1 つになる．

以下，それぞれの方法を紹介する．長いのでまとめの節を見るのも良い．

2　部分群列 $\mathrm{SU}(4) \supset \mathrm{SO}(4) \supset \mathrm{SO}(2) \times \mathrm{SO}(2)$ を用いる

2.1　角度部分の変数分離，$\mathrm{SO}(4)$ の既約表現への分解

一般に $D+1$ 次元の Laplacian は

$$\Delta_{\mathbb{R}^{D+1}} = \frac{1}{q^D}\frac{\partial}{\partial q}\left(q^D \frac{\partial}{\partial q}\right) + \frac{1}{q^2}\Delta_{S^D} \tag{23}$$

のように書くことができる．ここで，Δ_{S^D} は角度部分の変数による微分しか含まない微分演算子となっており，Laplace–Beltrami 演算子と呼ばれる．

これにより微分方程式は変数分離され，

$$\Psi = R_{n,k}(q)Y_{n,\alpha}(\Omega_D) \tag{24}$$

球面調和関数の理論によれば L を非負整数として角度部分の方程式は，

$$\Delta_{S^D}Y_{L,\alpha} = -L(L+D-1)Y_{L,\alpha} \tag{25}$$

と解かれる．同一固有値の解がなす線形空間の次元は

$$\dim V_L^{(D+1)} = {}_{L+D-1}C_L - {}_{L+D-3}C_{L-2} \tag{26}$$

となる．これらは $\mathrm{SO}(D+1)$ の既約表現に属する．

特に $D+1=4$ の場合，

$$\Delta_{S^3} = -\left(L_{12}^2 + L_{23}^2 + L_{31}^2 + L_{14}^2 + L_{24}^2 + L_{34}^2\right) \tag{27}$$

$$\dim V_L^{(4)} = {}_{L+3}C_L - {}_{L+1}C_{L-2} = \frac{(L+3)(L+2)(L+1)-(L+1)L(L-1)}{6} = (L+1)^2 \tag{28}$$

となる．

2.2　動径方向の微分方程式

動径方向の微分方程式は，

$$\left[-\frac{d^2}{dq^2} - \frac{3}{q}\frac{d}{dq} + q^2 + \frac{L(L+2)}{q^2}\right]R_{L,k} = \epsilon_{L,k}R_{L,k} \tag{29}$$

であるが，$2t = q^2$ とすると

$$\frac{d}{dq} = \sqrt{2t}\frac{d}{dt}, \frac{d^2}{dq^2} = 2t\frac{d^2}{dt^2} + \frac{d}{dt} \tag{30}$$

より，

$$\left[-2t\frac{d^2}{dt^2}-4\frac{d}{dt}+\frac{L(L+2)}{2t}+2t\right]R_{L,k}(\sqrt{t})=\epsilon_{L,k}R_{L,k}(\sqrt{t}) \tag{31}$$

となる．さらに，

$$\varphi_{L,k}(t)=tR_{L,k}(\sqrt{t}) \tag{32}$$

と置換すると，

$$\frac{d}{dt}\left(t^{-1}\varphi_{L,k}\right)=t^{-1}\frac{d\varphi_{L,k}}{dt}-t^{-2}\varphi_{L,k},\ \frac{d^2}{dt^2}\left(t^{-2}\varphi_{L,k}\right)=t^{-1}\frac{d^2\varphi_{L,k}}{dt^2}-2t^{-2}\frac{d\varphi_{L,k}}{dt}+2t^{-3}\varphi_{L,k} \tag{33}$$

を用いて，

$$\left[-2t\frac{d^2}{dt^2}+\frac{(L+1)^2-1}{2t}+2t\right]\varphi_{L,k}(t)=\epsilon_{L,k}\varphi_{L,k}(t) \tag{34}$$

となる．

ここで，

$$L=2l,\ s=\epsilon_{2l,k}t,\ \mathcal{E}_{l,k}=-\frac{1}{\epsilon_{2l,k}^2},\ \mathcal{H}_l=\left[-\frac{d^2}{ds^2}+\frac{l(l+1)}{s^2}-\frac{1}{2s}\right],\ \psi_{l,k}=\varphi_{2l,k} \tag{35}$$

とすると，

$$\mathcal{H}_l\psi_{l,k}=\mathcal{E}_{l,k}\psi_{l,k} \tag{36}$$

と整理することができる．

2.3　因数分解解法

$l>0$ で，

$$H_l=\alpha_l^\dagger\alpha_l+c_l \tag{37}$$

と書くことができる．但し，

$$\alpha_l=\frac{d}{ds}+\frac{l}{s}-\frac{1}{4l},\ \alpha_l^\dagger=-\frac{d}{ds}+\frac{l}{s}-\frac{1}{4l},\ c_l=-\frac{1}{16l^2} \tag{38}$$

とした．演算子間に

$$\left[\alpha_l,\alpha_l^\dagger\right]=-\frac{2l}{s^2} \tag{39}$$

という関係があることを用いている．

$l\geq 1$ で，

$$\alpha_l a_l^\dagger=\alpha_l^\dagger\alpha_l-\frac{2l}{s^2} \tag{40}$$

$$=H_l-c_l-\frac{2l}{s^2} \tag{41}$$

$$=H_{l-1}-c_l \tag{42}$$

となる．従って，$l \geq 0$ で，

$$H_l = \alpha_{l+1}\alpha^\dagger_{l+1} + c_{l+1} \tag{43}$$

となる．

$l \geq 0$ に対応する解が

$$H_l\psi_{l,k} = \mathcal{E}_{l,k}\psi_{l,k} \tag{44}$$

のように与えられたとすると，

$$\begin{aligned} H_{l+1}\alpha^\dagger_{l+1}\psi_{l,k} &= \left[\alpha^\dagger_{l+1}\alpha_{l+1} + c_{l+1}\right]\alpha^\dagger_{l+1}\psi_{l,k} \\ &= \left[\alpha^\dagger_{l+1}(\mathcal{H}_l - c_{l+1}) + c_{l+1}\alpha^\dagger_{l+1}\right]\psi_{l,k} \\ &= \mathcal{E}_{l,k}\alpha^\dagger_{l+1}\psi_{l,k} \end{aligned} \tag{45}$$

が成立する．

この等式より，$\alpha^\dagger_{l+1}\psi_{l,k} = 0$ でなければ $\alpha^\dagger_{l+1}\psi_{l,k}$ が $l+1$ に対応する解となり，かつ，ψ_l と同じエネルギー $\mathcal{E}_{l,k}$ を持つことが分かる．すなわち，l の大きい状態を作り出す上昇演算子（固有状態に作用する）である．しかも（固有状態に作用した場合）エネルギーを保つという特性を持つ．

さらに，$l \geq 1$ として，

$$\begin{aligned} H_{l-1}\alpha_l\psi_{l,k} &= \left[\alpha_l\alpha^\dagger_l + c_l\right]\alpha_l\psi_{l,n} \\ &= \left[\alpha_l(H_l - c_l) + c_l\alpha_l\right]\psi_{l,k} \\ &= \mathcal{E}_{l,k}\alpha_l\psi_{l,k} \end{aligned} \tag{46}$$

この等式より，$\alpha_l\psi_{l,k} = 0$ でなければ $\alpha_l\psi_{l,k}$ が $l-1$ に対応する解となり，かつ，ψ_l と同じエネルギー $\mathcal{E}_{l,k}$ を持つことが分かる．すなわち，l の小さい状態を作り出す下降演算子（固有状態に作用する）である．しかも（固有状態に作用した場合）エネルギーを保つという特性を持つ．

2.4　式 9 の固有値問題の束縛状態のスペクトルと縮重度

束縛状態のエネルギーの縮重度は有限である．したがって，固有状態が与えられたときに，上昇演算子，あるいは下降演算子を作用させて無限に状態を作ることは出来ない．上昇演算子については，$a^\dagger_{l+1}\psi = 0$ を満たす波動関数 ψ が存在すること，下降演算子については，量子数 l についての制限 $l \geq 1$ によって，作用させることのできる回数が有限であることが保証される．

ここで $l \geq 0$ に対して，$a^\dagger_{l+1}\psi = 0$ を満たす ψ は，明らかに H_l の固有状態である．すなわち，

$$H_l\psi = \left[a_{l+1}a^\dagger_{l+1} + c_{l+1}\right]\psi = c_{l+1}\psi \tag{47}$$

となる．この ψ を $\psi_{l,0}$ とすると，

$$\psi_{l,0} \propto s^{l+1}e^{-\frac{s}{4(l+1)}} \tag{48}$$

がその関数形である．対応する固有値は

$$\mathcal{E}_{l,0} = c_{l+1} = -\frac{1}{16(l+1)^2} \tag{49}$$

となる．

縮退している状態の数（縮重度）は以下のようにして分かる．$\mathcal{H}_{L/2}$ の固有状態である $\psi_{L/2,0}$ に下降演算子を作用させることで，L が 0 よりも大きい偶数のときは，$\mathcal{H}_{L/2-1}, \mathcal{H}_{L/2-2}, \cdots, \mathcal{H}_0$ の固有状態として

$$a_{L/2}\psi_{L/2,0},\ a_{L/2-1}a_{L/2}\psi_{L/2,0},\ \cdots,\ a_1\cdots a_{L/2-1}a_{L/2}\psi_{L/2,0}, \tag{50}$$

L が 1 よりも大きい奇数のときは，$\mathcal{H}_{L/2-1}, \mathcal{H}_{L/2-2}, \cdots, \mathcal{H}_{1/2}$ の固有状態として

$$a_{L/2}\psi_{L/2,0},\ a_{L/2-1}a_{L/2}\psi_{L/2,0},\ \cdots,\ a_{1/2}\cdots a_{L/2-1}a_{L/2}\psi_{L/2,0}, \tag{51}$$

を得ることができる．[*5] これらに対応する固有値はどれも $\mathcal{E}_{L/2,0}$ である．元の問題のエネルギーとしては，

$$\epsilon_{L,0} = \sqrt{-\frac{1}{\mathcal{E}_{L/2,0}}} = 2L+4 \tag{52}$$

である．

$\mathcal{H}_i$ のある状態に対応する角度部分の波動関数の縮重度は，$\dim V_{2i}^{(4)} = (2i+1)^2$ であるから，元の問題においてエネルギーが $\epsilon_n = 2n+4$ となる状態の縮重度は n が 0 以上の偶数のときは，

$$\begin{aligned}
\sum_{i=0}^{n/2} \dim V_{2i}^{(4)} &= \sum_{i=0}^{n/2} (2i+1)^2 \\
&= \sum_{i=1}^{n/2+1} (2i-1)^2 \\
&= 2\frac{(\frac{n}{2}+1)(\frac{n}{2}+2)(2\frac{n}{2}+3)}{3} - 2\left(\frac{n}{2}+1\right)\left(\frac{n}{2}+2\right) + \frac{n}{2} + 1 \\
&= \frac{(n+1)(n+2)(n+3)}{6} \\
&= {}_{n+3}C_3,
\end{aligned} \tag{53}$$

[*5] これらが 0 とならないことは，a_l の固有状態が $s^{-l}e^{\frac{s}{4l}}$ であるが，$\psi_{L/2,0}$ に任意の種類の下降演算子を任意の順番で作用させても $s^{-l}e^{\frac{s}{4l}}$ という項が発生し得ないことから分かる．

n が 1 以上の奇数のときは，

$$\begin{aligned}\sum_{i=0}^{(n-1)/2} \dim V_{2i+1}^{(4)} &= \sum_{i=0}^{(n-1)/2} (2i+2)^2 \\ &= \sum_{i=1}^{(n+1)/2} (2i)^2 \\ &= 2\frac{\frac{n+1}{2}(\frac{n+1}{2}+1)(2\frac{n+1}{2}+1)}{3} \\ &= \frac{(n+1)(n+2)(n+3)}{6} \\ &= {}_{n+3}C_3 \end{aligned} \tag{54}$$

であり，n が整数の場合は偶奇いずれでも，縮重度は

$${}_{n+3}C_3 \tag{55}$$

となる．以上より，束縛状態の波動関数（下降演算子と $\psi_{l,0}$ で書かれる）とエネルギーを求めることが出来た．

2.5　$\mathrm{SO}(2) \times \mathrm{SO}(2)$ の既約表現への分解

2.5.1　$\mathfrak{su}(2)$ 演算子の導入

まず，

$$\boldsymbol{L} = \left(L_{23}, L_{31}, L_{12}\right),\ \boldsymbol{M} = \left(L_{14}, L_{24}, L_{34}\right) \tag{56}$$

とすると，

$$[L_i, L_j] = \mathrm{i}\epsilon_{ijk} L_k,\ [L_i, M_j] = \mathrm{i}\epsilon_{ijk} M_k,\ [M_i, M_j] = \mathrm{i}\epsilon_{ijk} L_k, \tag{57}$$

が成立することがわかる．

次に

$$\boldsymbol{A} = \frac{1}{2}\left(\boldsymbol{L} + \boldsymbol{M}\right),\ \boldsymbol{B} = \frac{1}{2}\left(\boldsymbol{L} - \boldsymbol{M}\right) \tag{58}$$

とると，

$$[A_i, A_j] = \mathrm{i}\epsilon_{ijk} A_k,\ [B_i, B_j] = \mathrm{i}\epsilon_{ijk} B_k,\ [A_i, B_j] = 0 \tag{59}$$

が成立することがわかる．即ち，$\mathrm{i}A_1, \mathrm{i}A_2, \mathrm{i}A_3$ の組と $\mathrm{i}B_1, \mathrm{i}B_2, \mathrm{i}B_3$ の組は独立に $\mathrm{su}(2)$ となっている．

他に

$$\boldsymbol{L} \cdot \boldsymbol{M} = \boldsymbol{M} \cdot \boldsymbol{L} = 0 \tag{60}$$

より，

$$A^2 = B^2 \tag{61}$$

が成立し，

$$-\Delta_{S^3} = L^2 + M^2 = 2\left(A^2 + B^2\right) = 4A^2 = 4B^2 \tag{62}$$

となることがわかる．

2.5.2 $\mathfrak{so}(4) = \mathfrak{su}(2) \oplus \mathfrak{su}(2)$ の既約表現

階数が 2 なので Lie 代数 $\mathfrak{so}(4)$ では独立な Casimir 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，$\mathfrak{so}(4)$ の既約表現を考えたときにその表現空間では $\boldsymbol{A}^2$ や $\boldsymbol{B}^2$ 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 Lie 代数 $\mathfrak{su}(2)$ 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，

$$\boldsymbol{A}^2|l_a, m_a\rangle_a = l_a(l_a + 1)|l_a, m_a\rangle_a \tag{63}$$
$$A_3|l_a, m_a\rangle_a = m_a|l_a, m_a\rangle_a \tag{64}$$

である．

同様に $\boldsymbol{B}$ の成分を基底とする $\mathfrak{su}(2)$ 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，

$$\boldsymbol{B}^2|l_b, m_b\rangle_b = l_b(l_b + 1)|l_b, m_b\rangle_b \tag{65}$$
$$B_3|l_b, m_b\rangle_b = m_b|l_b, m_b\rangle_b \tag{66}$$

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 Hilbert 空間

$$\{|l_a, m_a\rangle_a|l_b, m_b\rangle_b | m_a = -l_a, -l_a + 1, \cdots, l_a - 1, l_a, m_b = -l_b, -l_b + 1, \cdots, l_b - 1, l_b\} \tag{67}$$

が $\mathfrak{so}(4)$ 代数の一つの既約表現に属する．

$l_a = l_b = \frac{L}{2}$ が課されるので，各固有状態の直積の形で表される $\left(\frac{L}{2} + 1\right)^2$ 個の状態からなる Hilbert 空間

$$\left\{|l, m_a\rangle_a|l, m_b\rangle_b \middle| m_a = -\frac{L}{2}, -\frac{L}{2} + 1, \cdots, \frac{L}{2} - 1, \frac{L}{2}, m_b = -\frac{L}{2}, -\frac{L}{2} + 1, \cdots, \frac{L}{2} - 1, \frac{L}{2}\right\} \tag{68}$$

のみが許される．このとき

$$\Delta_{S^3} = -4A^2 = -4\frac{L}{2}\left(\frac{L}{2} + 1\right) = -L(L + 1) \tag{69}$$

である．

2.6　拘束条件式 10 を課した解

前節において

$$A_3 = \frac{1}{2}(L_{12} + L_{34}) = 0 \tag{70}$$

となる部分空間のみ考えることになる．$m_a = 0$ となるためには L は偶数である必要がある．

このような部分空間は

$$\left\{ |l,0\rangle_a |l,m_b\rangle_b \middle| m_b = -\frac{L}{2}, -\frac{L}{2}+1, \cdots, \frac{L}{2}-1, \frac{L}{2} \right\} \tag{71}$$

となるが，部分空間次元は $L+1$ 次元である．L は角運動量量子数に相当するが，これが偶数である時はエネルギー量子数 n は偶数となる．

n を偶数としてエネルギーが $\epsilon_n = 2n+4$ となる状態の縮重度は

$$\sum_{i=0}^{n/2}(2i+1) = \sum_{i=1}^{n/2+1}(2i-1) = \left(\frac{n}{2}+1\right)\left(\frac{n}{2}+2\right) - \left(\frac{n}{2}+1\right) = \left(\frac{n}{2}+1\right)^2 \tag{72}$$

となる．

3　部分群列 $\mathrm{SU}(4) \supset \mathrm{SU}(2) \otimes \mathrm{SU}(2) \supset \mathrm{SO}(2) \times \mathrm{SO}(2)$ を用いる

3.1　$\mathrm{SU}(2) \otimes \mathrm{SU}(2)$ の既約表現への分解

$i \neq j$ に対して，

$$T_{ij} = a_i^\dagger a_i - a_j^\dagger a_j = N_i - N_j \tag{73}$$

とする．

わかりやすさのために行列代数との対応関係を用いると，

$$S_{12} \leftrightarrow \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},\ L_{12} \leftrightarrow \begin{pmatrix} 0 & -\mathrm{i} & 0 & 0 \\ \mathrm{i} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},\ T_{12} = \frac{1}{2}(N_{13}+N_{14}) \leftrightarrow \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \tag{74}$$

$$S_{34} \leftrightarrow \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix},\ L_{34} \leftrightarrow \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\mathrm{i} \\ 0 & 0 & \mathrm{i} & 0 \end{pmatrix},\ T_{34} = \frac{1}{2}(N_{13}-N_{14}) \leftrightarrow \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{75}$$

となっている．従って，

$$A = \left(\tfrac{1}{2}T_{12},\ \tfrac{1}{2}S_{12},\ \tfrac{1}{2}L_{12}\right) \tag{76}$$

$$B = \left(\tfrac{1}{2}T_{34},\ \tfrac{1}{2}S_{34},\ \tfrac{1}{2}L_{34}\right) \tag{77}$$

とおくと，

$$[A_i, A_j] = \mathrm{i}\epsilon_{ijk}A_k,\ [B_i, B_j] = \mathrm{i}\epsilon_{ijk}B_k,\ [A_i, B_j] = 0 \tag{78}$$

となっていることがわかる．これら 6 演算子は $\mathrm{SU}(2) \otimes \mathrm{SU}(2)$ を生成する．

$$A^2 = \frac{1}{4}(S_{12}^2 + L_{12}^2 + T_{12}^2) = \frac{1}{4}(N_1 + N_2)(N_1 + N_2 + 2) \tag{79}$$

$$B^2 = \frac{1}{4}(S_{34}^2 + L_{34}^2 + T_{34}^2) = \frac{1}{4}(N_3 + N_4)(N_3 + N_4 + 2) \tag{80}$$

であり，A^2, B^2 の固有値を $l_a(l_a+1), l_b(l_b+1)$（l_a, l_b は非負半整数）とすると，N_1+N_2 及び N_3+N_4 がスカラーとなっており，それぞれ

$$2l_a,\ 2l_b \tag{81}$$

の関係にあることがわかる．この部分空間の次元は

$$(2l_a+1)(2l_b+1) \tag{82}$$

である．ここで，$N_1+N_2+N_3+N_4 = \mathcal{N}$ であるために $\mathcal{N}$ の固有状態を考える限り，N_1+N_2 と N_3+N_4 は独立ではないことに注意.

3.2 式 9 の固有値問題の束縛状態のスペクトルと縮重度

エネルギーは非負整数 $n = 2(l_a + l_b)$ で定まる．

$$\mathcal{H} = 2(N_1 + N_2 + N_3 + N_4) + 4 \tag{83}$$

であるから，エネルギーは

$$\epsilon_n = 2n + 4 \tag{84}$$

である．エネルギーが $\epsilon_n = 2n+4$ になる状態の縮重度は

$$\begin{aligned}\sum_{i=0}^{n}(i+1)(n-i+1) &= \sum_{i=1}^{n+1} i(n-i+2)\\ &= -\frac{(n+1)(n+2)(2n+3)}{6} + \frac{(n+1)(n+2)^2}{2}\\ &= \frac{(n+1)(n+2)(n+3)}{6}\\ &= {}_{n+3}C_3\end{aligned} \tag{85}$$

である．

3.3 $\mathrm{SO}(2) \times \mathrm{SO}(2)$ の既約表現への分解

$A^2,\ B^2,\ A_3,\ B_3$ を同時対角化する表示を採用すると A_3, B_3 の固有値を m_a, m_b とすると，$L_{12},\ L_{34}$ もスカラーとなるので，それぞれ

$$2m_a,\ 2m_b \tag{86}$$

となっている．

3.4 拘束条件式 10 を課した解

$m_a = -m_b$ を課した部分空間に制限することに相当する．l_a, l_b は共に半整数あるいは，共に整数である必要がある．すなわち，$n = 2(l_a + l_b)$ が偶数である必要がある．$\{|l_a, m_a\rangle_a |l_b, -m_a\rangle_b | -\min(l_a, l_b) \leq m_a \leq \min(l_a, l_b)\}$ この部分空間の次元は $\min(2l_a, 2l_b) + 1$

このときのエネルギーが $\epsilon_n = 2n + 4$ になる状態の縮重度は

$$\sum_{i=0}^{n} (\min(i, n-i) + 1) = 2\sum_{i=1}^{\frac{n}{2}} i + \frac{n}{2} + 1 = \left(\frac{n}{2} + 1\right)^2 \tag{87}$$

4 まとめ

まとめを再掲すると，それぞれの手法は，

- 互いに可換で独立な $\mathcal{H}$，Δ_{S^3}，L_{12} を同時対角化する手法．
  但しそれぞれ $\mathrm{SU}(4), \mathrm{SO}(4), \mathrm{SO}(2) \times \mathrm{SO}(2)$ の Casimir 演算子となっている．
- 互いに可換で独立な $\mathcal{H}$，$N_1 + N_2$，L_{12} を同時対角化する手法．
  但しそれぞれ $\mathrm{SU}(4), \mathrm{SU}(2) \otimes \mathrm{SU}(2), \mathrm{SO}(2) \times \mathrm{SO}(2)$ の Casimir 演算子となっている．

ということである．それぞれの手法について，以下に式 10 の拘束がある場合とない場合とを比較したまとめを記述する．

4.1 部分群列 $\mathrm{SU}(4) \supset \mathrm{SO}(4) \supset \mathrm{SO}(2) \times \mathrm{SO}(2)$ を用いる場合

式 10 の拘束が無い場合，式 9 において，

$$\mathcal{H},\ \Delta_{S^D} = -\left(L_{12}^2 + L_{23}^2 + L_{31}^2 + L_{14}^2 + L_{24}^2 + L_{34}^2\right),\ L_{12},\ L_{34}$$

が独立かつ互いに可換な演算子である．従って，$\mathcal{H}$ の固有状態はこれら 4 つの同時固有状態で書くことができる．

$n \geq 0$ 整数，L を n 以下の n と偶奇を同じくする整数，$l_{12}, l_{34} = -\frac{L}{2}, \cdots, \frac{L}{2}$ として，それぞれの固有値は

$$\epsilon_n = 2n + 4, -L(L+2), l_{12}, l_{34}$$

となる．縮重度は ${}_{n+3}C_n$ である．

一方で，式 10 を拘束条件として課した場合，L_{12} と L_{34} とは独立では無くなるから，式 9 においては，

$$\mathcal{H},\ \Delta_{S^D},\ L_{12}$$

が独立かつ互いに可換な演算子である．従って，$\mathcal{H}$ の固有状態はこれら 3 つの同時固有状態で書くことができる．

$n \geq 0$ 偶数，L を n 以下の偶数，$l_{12} = -\frac{L}{2}, \cdots, \frac{L}{2}$ として，それぞれの固有値は

$$\epsilon_n = 2n+4, -L(L+2), l_{12}$$

となる．縮重度は $\left(\frac{n}{2}+1\right)^2$ である．

4.2 部分群列 $\mathrm{SU}(4) \supset \mathrm{SU}(2) \otimes \mathrm{SU}(2) \supset \mathrm{SO}(2) \times \mathrm{SO}(2)$ を用いる場合

式 10 の拘束が無い場合，式 9 において，

$$\mathcal{H},\ N_1+N_2,\ L_{12},\ L_{34}$$

が独立かつ互いに可換な演算子である．従って，$\mathcal{H}$ の固有状態はこれら 4 つの同時固有状態で書くことができる．

$n \geq 0$ 整数，$2l_a$ を n 以下の整数，$l_{12} = -l_a, \cdots, l_a$，$l_{34} = -\left(\frac{n}{2}-l_a\right), \cdots, \left(\frac{n}{2}-l_a\right)$ として，それぞれの固有値は

$$\epsilon_n = 2n+4, 2l_a, l_{12}, l_{34}$$

となる．縮重度は ${}_{n+3}C_n$ である．

一方で，式 10 を拘束条件として課した場合，L_{12} と L_{34} とは独立では無くなるから，式 9 においては，

$$\mathcal{H},\ N_1+N_2,\ L_{12}$$

が独立かつ互いに可換な演算子である．従って，$\mathcal{H}$ の固有状態はこれら 3 つの同時固有状態で書くことができる．

$n \geq 0$ 偶数，$2l_a$ を n 以下の整数，$l_{12} = -\min\left(l_a, \left(\frac{n}{2}-l_a\right)\right), \cdots, \min\left(l_a, \left(\frac{n}{2}-l_a\right)\right)$ として，それぞれの固有値は

$$\epsilon_n = 2n+4, 2l_a, l_{12}$$

となる．縮重度は $\left(\frac{n}{2}+1\right)^2$ である．