Kustaanheimo–Stiefel 変換

（その 4）Schrödinger 方程式を解く

adhara*

2021 年 5 月 3 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

■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．

■Kustaanheimo–Stiefel 変換

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．

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

の関係にある．

[*1] 極点を除けば

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．

■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．

2 Schrödinger 方程式の求解

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．

2.1　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．

2.2　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，$a_i^\dagger a_j, 1 \le i, j \le 4$ 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，

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

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

ここで，

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

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ことから，$\mathfrak{su}(4)$ を対称性を記述する Lie 代数であると考える．

部分群への既約表現二通りのアプローチがある．

3　SU(4) ⊃ SO(4)

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．

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

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

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

$$\dim V_L^{(4)} = {}_{L+3}C_L - {}_{L+1}C_{L-2} = \frac{(L+3)(L+2)(L+1)-(L+1)L(L-1)}{6} = (L+1)^2 \tag{27}$$

3.1　拘束条件を課す前

$$\left[-\frac{d^2}{dq^2} - \frac{3}{q}\frac{d}{dq} + q^2 + \frac{L(L+2)}{q^2}\right]R_{L,k} = \epsilon_{L,k}R_{L,k} \tag{28}$$

$2t = q^2$ とすると

$$\frac{d}{dq} = \sqrt{2t}\frac{d}{dt}, \frac{d^2}{dq^2} = 2t\frac{d^2}{dt^2} + \frac{d}{dt} \tag{29}$$

より，

$$\left[-2t\frac{d^2}{dt^2} - 4\frac{d}{dt} + \frac{L(L+2)}{2t} + 2t\right]R_{L,k}(\sqrt{t}) = \epsilon_{L,k}R_{L,k}(\sqrt{t}) \tag{30}$$

$$\varphi_{L,k}(t) = tR_{L,k}(\sqrt{t}) \tag{31}$$

と置換すると，

$$\frac{d}{dt}\left(t^{-1}\varphi_{L,k}\right) = t^{-1}\frac{d\varphi_{L,k}}{dt} - t^{-2}\varphi_{L,k}, \frac{d^2}{dt^2}\left(t^{-2}\varphi_{L,k}\right) = t^{-1}\frac{d^2\varphi_{L,k}}{dt^2} - 2t^{-2}\frac{d\varphi_{L,k}}{dt} + 2t^{-3}\varphi_{L,k} \tag{32}$$

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

さらに

$$L=2l,\ s=\epsilon_{2l,k}t,\ \mathcal{E}_{l,k}=-\frac{1}{\epsilon_{2l,k}^2},\ \mathcal{H}_l=\left[-\frac{d^2}{ds^2}+\frac{l(l+1)}{s^2}-\frac{1}{2s}\right],\ \psi_{l,k}=\varphi_{2l,k} \tag{34}$$

とすると，

$$\mathcal{H}_l\psi_{l,k}=\mathcal{E}_{l,k}\psi_{l,k} \tag{35}$$

となる．

$l>0$ で，

$$\alpha_l=\frac{d}{ds}+\frac{l}{s}-\frac{1}{4l},\ \alpha_l^\dagger=-\frac{d}{ds}+\frac{l}{s}-\frac{1}{4l},\ c_l=-\frac{1}{16l^2} \tag{36}$$

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

$$\left[\alpha_l,\alpha_l^\dagger\right]=-\frac{2l}{s^2} \tag{38}$$

$l\geq 1$ で，

$$\begin{aligned}\alpha_l a_l^\dagger&=\alpha_l^\dagger\alpha_l-\frac{2l}{s^2} &(39)\\ &=H_l-c_l-\frac{2l}{s^2} &(40)\\ &=H_{l-1}-c_l &(41)\end{aligned}$$

となる．従って，$l\geq 0$ で，

$$H_l=\alpha_{l+1}\alpha_{l+1}^\dagger+c_{l+1} \tag{42}$$

$l\geq 0$ に対応する解が

$$H_l\psi_{l,k}=\mathcal{E}_{l,k}\psi_{l,k} \tag{43}$$

のように与えられたとすると，

$$\begin{aligned}H_{l+1}\alpha_{l+1}^\dagger\psi_{l,k}&=\left[\alpha_{l+1}^\dagger\alpha_{l+1}+c_{l+1}\right]\alpha_{l+1}^\dagger\psi_{l,k}\\ &=\left[\alpha_{l+1}^\dagger(\mathcal{H}_l-c_{l+1})+c_{l+1}\alpha_{l+1}^\dagger\right]\psi_{l,k}\\ &=\mathcal{E}_{l,k}\alpha_{l+1}^\dagger\psi_{l,k} &(44)\end{aligned}$$

が成立する．

この等式より，$\alpha_{l+1}^\dagger\psi_{l,k}=0$ でなければ $\alpha_{l+1}^\dagger\psi_{l,k}$ 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，

$$\begin{aligned} H_{l-1}\alpha_l\psi_{l,k} &= \left[\alpha_l\alpha_l^\dagger + c_l\right]\alpha_l\psi_{l,n} \\ &= \left[\alpha_l(H_l-c_l)+c_l\alpha_l\right]\psi_{l,k} \\ &= \mathcal{E}_{l,k}\alpha_l\psi_{l,k} \end{aligned} \tag{45}$$

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．

3.2　束縛状態のスペクトルと縮重度

■スペクトル

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，$a_{l+1}^\dagger\psi=0$ 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，$a_{l+1}^\dagger\psi=0$ を満たす ψ は，明らかに H_l の固有状態である．すなわち，

$$H_l\psi = \left[a_{l+1}a_{l+1}^\dagger + c_{l+1}\right]\psi = c_{l+1}\psi \tag{46}$$

となる．この ψ を $\psi_{l,0}$ とすると，

$$\psi_{l,0}\propto s^{l+1}e^{-\frac{s}{4(l+1)}} \tag{47}$$

がその関数形である．対応する固有値は

$$\mathcal{E}_{l,0}=c_{l+1}=-\frac{1}{16(l+1)^2} \tag{48}$$

となる．

■元の問題の縮重度

縮退している状態の数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

$$a_{L/2}\psi_{L/2,0},\ a_{L/2-1}a_{L/2}\psi_{L/2,0},\ \cdots,\ a_1\cdots a_{L/2-1}a_{L/2}\psi_{L/2,0}, \tag{49}$$

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

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

を得ることができる．[*3] 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，

$$\epsilon_{L,0} = \sqrt{-\frac{1}{\mathcal{E}_{L/2,0}}} = 2L+4 \tag{51}$$

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，

$$\begin{aligned}
\sum_{i=0}^{n/2} \dim V_{2i}^{(4)} &= \sum_{i=0}^{n/2} (2i+1)^2 \\
&= \sum_{i=1}^{n/2+1} (2i-1)^2 \\
&= 2\frac{(\frac{n}{2}+1)(\frac{n}{2}+2)(2\frac{n}{2}+3)}{3} - 2\left(\frac{n}{2}+1\right)\left(\frac{n}{2}+2\right) + \frac{n}{2}+1 \\
&= \frac{(n+1)(n+2)(n+3)}{6} \\
&= {}_{n+3}C_3,
\end{aligned} \tag{52}$$

n が 1 以上の奇数のときは，

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

であり，n が整数の場合は偶奇いずれでも，縮重度は

$${}_{n+3}C_3 \tag{54}$$

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．

[*3] 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．

3.3 $\mathfrak{su}(2)$ 演算子の導入

$$\boldsymbol{L}=\left(L_{23},L_{31},L_{12}\right),\ \boldsymbol{M}=\left(L_{14},L_{24},L_{34}\right) \tag{55}$$

$$[L_i,L_j]=\mathrm{i}\epsilon_{ijk}L_k,\ [L_i,M_j]=\mathrm{i}\epsilon_{ijk}M_k,\ [M_i,M_j]=\mathrm{i}\epsilon_{ijk}L_k, \tag{56}$$

$$\boldsymbol{A}=\frac{1}{2}\left(\boldsymbol{L}+\boldsymbol{M}\right),\ \boldsymbol{B}=\frac{1}{2}\left(\boldsymbol{L}-\boldsymbol{M}\right) \tag{57}$$

$$[A_i,A_j]=\mathrm{i}\epsilon_{ijk}A_k,\ [B_i,B_j]=\mathrm{i}\epsilon_{ijk}B_k,\ [A_i,B_j]=0 \tag{58}$$

$$\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{M}=\boldsymbol{M}\cdot\boldsymbol{L}=0 \tag{59}$$

より，

$$A^2=B^2 \tag{60}$$

$$-\Delta_{S^3}=L^2+M^2=2\left(A^2+B^2\right)=4A^2=4B^2 \tag{61}$$

3.4 $\mathfrak{so}(4)=\mathfrak{su}(2)\oplus\mathfrak{su}(2)$ 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，

$$\boldsymbol{A}^2|l_a,m_a\rangle_a=l_a(l_a+1)|l_a,m_a\rangle_a \tag{62}$$
$$A_3|l_a,m_a\rangle_a=m_a|l_a,m_a\rangle_a \tag{63}$$

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，

$$\boldsymbol{B}^2|l_b, m_b\rangle_b = l_b(l_b+1)|l_b, m_b\rangle_b \tag{64}$$

$$B_3|l_b, m_b\rangle_b = m_b|l_b, m_b\rangle_b \tag{65}$$

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

$$\{|l_a, m_a\rangle_a|l_b, m_b\rangle_b|m_a = -l_a, -l_a+1, \cdots, l_a-1, l_a, m_b = -l_b, -l_b+1, \cdots, l_b-1, l_b\} \tag{66}$$

が $\mathfrak{so}(4)$ 代数の一つの既約表現に属する．

$l_a = l_b = \frac{L}{2}$ が課されると，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

$$\left\{|l, m_a\rangle_a|l, m_b\rangle_b \middle| m_a = -\frac{L}{2}, -\frac{L}{2}+1, \cdots, \frac{L}{2}-1, \frac{L}{2}, m_b = -\frac{L}{2}, -\frac{L}{2}+1, \cdots, \frac{L}{2}-1, \frac{L}{2}\right\} \tag{67}$$

$$\Delta_{S^3} = -4A^2 = -4\frac{L}{2}\left(\frac{L}{2}+1\right) = -L(L+1) \tag{68}$$

3.5 拘束条件を課すと

$$A_3 = \frac{1}{2}(L_{12}+L_{34}) = 0 \tag{69}$$

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．

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

となる部分空間は

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

となるが，この次元は $L+1$ 次元．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．

4　$\mathrm{SU}(4) \supset \mathrm{SU}(2) \times \mathrm{SU}(2)$

$i \neq j$ 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．

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

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

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

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

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

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

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

$\{|l_a, m_a\rangle_a |l_b, m_b\rangle_b | m_a, m_b\}$ においては，$N_1 + N_2$ 及び $N_3 + N_4$ がスカラーとなっており，それぞれ

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

となる．

$$\mathcal{H} = 2(N_1 + N_2 + N_3 + N_4) + 4 \tag{82}$$

であるから，エネルギーは

$$\epsilon_{l_a, l_b} = 4(l_a + l_b + 1) \tag{83}$$

A^2, B^2, A_2, B_2 を同時対角化する表示では $\{|l_a, m_a\rangle_a |l_b, m_b\rangle_b | m_a, m_b\}$ においては，L_{12}, L_{34} もスカラーとなっており，それぞれ

$$2m_a,\ 2m_b \tag{84}$$

となっている．この Hilbert 空間の次元は

$$(2l_a+1)(2l_b+1) \tag{85}$$

エネルギーは $n=2(l_a+l_b)$ で定まる．エネルギーが $\epsilon_n=2n+4$ になる状態の縮重度は

$$\sum_{i=0}^{n}(i+1)(n-i+1)=\sum_{i=1}^{n+1}i(n-i+2) \tag{86}$$

$$=-\frac{(n+1)(n+2)(2n+3)}{6}+\frac{(n+1)(n+2)^2}{2} \tag{87}$$

$$=\frac{(n+1)(n+2)(n+3)}{6}$$

$$={}_{n+3}C_3 \tag{88}$$

4.1 拘束条件を課すと

$m_a=-m_b$ 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．$\{|l_a,m_a\rangle_a|l_b,-m_a\rangle_b|-\min(l_a,l_b)\le m_a\le\min(l_a,l_b)\}$ 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

$$\sum_{i=0}^{n}(\min(i,n-i)+1)=2\sum_{i=1}^{\frac{n}{2}}i+\frac{n}{2}+1=\left(\frac{n}{2}+1\right)^2 \tag{89}$$

5 まとめ

5.1 SU(4) ⊃ SO(4)

式 10 の拘束が無い場合，式 9 において，

$$\mathcal{H},\ \Delta_{S^D},\ L_{12},\ L_{34}$$

が独立かつ互いに可換な演算子である．

$n\ge 0$ 整数，L を n 以下の n と偶奇を同じくする整数，$l_{12},l_{34}=-\frac{L}{2},\cdots,\frac{L}{2}$

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

縮重度は ${}_{n+3}C_n$

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，$l_{12} = -\frac{L}{2}, \cdots, \frac{L}{2}$

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

縮重度は $\left(\frac{n}{2}+1\right)^2$

5.2 $\mathrm{SU}(4) \supset \mathrm{SU}(2) \times \mathrm{SU}(2)$

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．

$n \geq 0$ 整数，$2l_a$ を n 以下の整数，$l_{12} = -l_a, \cdots, l_a$，$l_{34} = -\left(\frac{n}{2} - l_a\right), \cdots, \left(\frac{n}{2} - l_a\right)$

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

縮重度は ${}_{n+3}C_n$

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，$l_{12} = -\min\left(l_a, \left(\frac{n}{2} - l_a\right)\right), \cdots, \min\left(l_a, \left(\frac{n}{2} - l_a\right)\right)$

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

縮重度は $\left(\frac{n}{2}+1\right)^2$