相対論的水素原子に潜む $\mathcal{N}=2$ 超対称性

adhara*

2022 年 7 月 3 日

目次

* Twitter @adhara_mathphys

1　はじめに

■水素原子と非相対論的および相対論的量子力学の成立

水素原子の研究は非相対論的および相対論的な量子力学の成立に関わりが深い。

水素原子と非相対論的量子力学の関わりは 1885 年に Balmer [1] の発見した水素原子の発光スペクトル線の間隔に関する法則に始まる。1890 年には Balmer の発見を受けて Rydberg の公式 [2] が提唱され、新たな発光スペクトルの存在が予想された。Rydberg の公式の正しさは 20 世紀中の Balmer 系列以外のスペクトル系列の観測 [3–7] により確認された。Rydberg の公式の意味は、20 世紀の初頭に現れた Bohr–Sommerfeld の量子化 [9–12] 等の前期量子論によって説明されるようになった。すなわち、水素原子において取り得るエネルギーが離散化され、

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

となることが理解されたのである。離散化されたエネルギーをエネルギー準位といい、スペクトル輝線に相当する発光エネルギーはエネルギー準位差で与えられる。この前期量子論の結果を包含する新しい枠組みが量子力学である。Schrödinger 方程式の提案 [13] は量子力学の成立に関わるものであるが、提案と同時に水素原子の Schrödinger 方程式が実際に解かれた。

相対論的量子力学の成立についても水素原子は関わりが深い。上記の公式では相対論効果によるスペクトルの微小な分裂すなわち微細構造が考慮されていなかったが、この微細構造については 1887 年に Michelson と Morley [8] によって水素原子中で発見されている。水素原子の微細構造の理論的説明は 1916 年に Sommerfeld [12] が前期量子論の手法によって行った。この時に微細構造定数が導入されている。どの微細構造の説明のために相対論的な量子力学を構築する動きがあった。例えば、Schrödinger 方程式の発表に先立って Schrödinger は相対論的な波動方程式を考案して水素原子の微細構造スペクトルを説明しようとしていた。この波動方程式はのちに Fock、Klein、Gordon らが考察した Klein–Gordon 方程式 [14–16] と同じものである。しかしながら、この Klein–Gordon 方程式からは水素原子の微細構造を説明することができなかった。後に水素原子の微細構造を説明にするためには電子スピンの自由度を考慮することが重要であることが Darwin と Gordon [18, 19] によって明らかとなる。Darwin と Gordon が解いた方程式は同年に Dirac が先立って発表した Dirac 方程式 [17] の水素原子版である。Dirac 方程式はスピン 1/2 の荷電粒子に対する量子力学の基礎方程式である。

■非相対論的水素原子に潜む超対称性

量子力学の成立以降、水素原子の Schrödinger 方程式の数理的構造を調べる研究が数多くなされてきた。その中の研究の一群に非相対論的水素原子に存在する力学的対称性に関するものがある。水素原子の力学的対称性の研究は Pauli が角運動量ベクトルと量子力学版 Laplace–Runge–Lenz（LRL）ベクトル [20] から構成されるリー代数の表現論を利用して水素原子のスペクトルを求めた [21] ことに始まる。その後、Fock が水素原子には四次元の回転対称性が潜むことを明らかにし [22]、Bargmann が LRL ベクトルが角運動量とともに四次元の回転群 SO(4) を生成するリー代数 $\mathfrak{so}(4)$ を構成することを明らかにした [23]。この四次元の回転対称性は水素原子の高度な縮退として現れる。すなわち、通常の球対称性

を持つポテンシャルにおいては主量子数と角運動量量子数によってエネルギーが決まるところ、水素原子のようなクーロンポテンシャルにおいてはは主量子数のみによってエネルギーが決まるという特徴がある。すなわち主量子数が同じならば角運動量量子数が同じであれば同じエネルギーとなる。

水素原子に関するもう一群の研究として超対称性（SUSY）に関するものがある。非相対論的水素原子には $\mathcal{N}=2$ SUSY 代数の構造が潜むのだが、歴史的には Schrödinger によって発見された因数分解 (factorization) を用いた方法 [24] に遡る。因数分解解法については Dirac [25] や Weyl [26] による示唆があったが、のちに Infeld と Hull [27] によって多くのポテンシャルについて体系的にまとめられた。時を経て実はこの因数分解解法が SO(4) とは別の対称性の存在を示唆するものであることがわかった。それが Witten の提唱した SUSY 量子力学 [30, 31] で登場する $\mathcal{N}=2$ 対称性である。様々な可解ポテンシャルの系でこの対称性が潜むことがわかったが、特に水素原子について発見したのは Kostelecky–Nieto [32] である。さらに Tangerman–Tjon はスピンあり非相対論的水素原子において同じ SUSY を発見した [33]。Tangerman–Tjon の発見した $\mathcal{N}=2$ SUSY 代数の特徴は SUSY を記述するために必要な supercharge が実は LRL ベクトルを用いて構成される点である。

■相対論的水素原子に潜む超対称性

相対論的水素原子については微細構造に基づくエネルギー分裂があるために SO(4) よりも低い対称性があることが知られていた。一方で、$2s_{1/2}$ と $2p_{1/2}$ の組み合わせ等が縮退していることからわかるように、SU(2) よりは高い対称性があることが想定されていた。ただし、長らくこの対称性の正体はわかっていなかった。

この対称性を理解するきっかけとなったのが、Johnson–Lippmann が 1950 年に導出なしに発表した相対論的水素原子のハミルトニアンと可換な演算子である Lippmann–Johnson 演算子 [29] である。この発表は論文とはいえ数百 words ほどの短い概要のみのものであり、どのように導出されたのかは今でもわからない。現代ではこれを解説する教育的な論文 [36] が存在する。この対称性が非相対論的水素原子の時にも存在していた $\mathcal{N}=2$ SUSY であることを示唆したのは Tangerman–Tjon [33] であり、Dahl–Jørgensen [34] が Johnson–Lippmann 演算子が $\mathcal{N}=2$ SUSY 代数を構成するための supercharge の一つであることを示した。後に Katsura–Aoki によって高次元の相対論的水素原子に拡張された [35]。

■本ノートの構成

本ノートは以下のような構成になっている。第 2 章では三種類の水素原子に関する波動方程式（Schrödinger 方程式、Klein–Gordon 方程式、Dirac 方程式）について束縛状態のエネルギーを求める。第 3 章では $\mathcal{N}=2$ SUSY 代数を説明する。第 4 章では非相対論的水素原子に潜む $\mathcal{N}=2$ SUSY、第 5 章で相対論的水素原子（Dirac の方）に潜む $\mathcal{N}=2$ SUSY について説明する。第 6 章でまとめを記す。

2 （非）相対論的水素原子の波動方程式と束縛エネルギー解

この章では水素原子の三種類の波動方程式（Schrödinger 方程式、Klein–Gordon 方程式、Dirac 方程式）から束縛状態のエネルギーを求める。Schrödinger 方程式、Dirac 方程式については教科書で見か

けることは多いが、Klein–Gordon 方程式については見かけることはやや少ないと思われる [28]。

2.1 水素原子の波動方程式

水素原子の Schrödinger 方程式、Klein–Gordon 方程式、Dirac 方程式はそれぞれ、

$$\left(-\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m_e}-\frac{\kappa}{r}-E\right)\Psi=0 \tag{2}$$

$$\left[\left(E+\frac{\kappa}{r}\right)^2+\hbar^2c^2\nabla^2-m_e^2c^4\right]\Psi=0 \tag{3}$$

$$\left[\left(E+\frac{\kappa}{r}\right)-\frac{\hbar c}{\mathrm{i}}\nabla\cdot\boldsymbol{\sigma}\rho_1-m_ec^2\rho_3\right]\Psi=0 \tag{4}$$

で与えられる。ただし、

$$\kappa=\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \tag{5}$$

である。また、Dirac 方程式で出てくる σ_i,ρ_j は非可換な演算子である。

$$\tau_1=\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix},\quad \tau_2=\begin{pmatrix}0&-\mathrm{i}\\\mathrm{i}&0\end{pmatrix},\quad \tau_3=\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix},\quad I=\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix} \tag{6}$$

として、

$$\rho_i=I\otimes\tau_i,\ \sigma=\tau_i\otimes I\quad(i=1,2,3) \tag{7}$$

とする。ここで記号 $\otimes$ は行列のクロネッカー積を表す。

2.2 波動方程式の無次元化

水素原子における相対論効果を考える際には微細構造定数として

$$\alpha=\frac{\kappa}{\hbar c} \tag{8}$$

を導入すると便利である。微細構造定数は無次元量である。

また、それぞれの波動方程式も動径 r に関して無次元化しておくと便利である。典型な長さとしてここではボーア半径

$$a_0=\frac{\hbar^2}{m_e\kappa}=\frac{\hbar}{m_ec\alpha} \tag{9}$$

を採用して規格化を行う。これらを用いることでエネルギー E や質量 m_e を無次元化して表示することができる。それらを

$$E'=\frac{E}{c\hbar a_0},\ m_e'=\frac{m_ec}{\hbar a_0} \tag{10}$$

としよう。

無次元化するためには $a_0 r' = r$ とした後に $r' = r$ と置き直す。すると、Schrödinger 方程式の無次元化方程式として、

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} - \frac{\boldsymbol{L}^2}{r^2} + \frac{2m_e'\alpha}{r} + 2E'm_e'\right]\Psi = 0 \tag{11}$$

を得る。同様に Klein–Gordon 方程式の無次元化方程式として、

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} - \frac{\boldsymbol{L}^2 - \alpha^2}{r^2} + \frac{2E'\alpha}{r} + E'^2 - m_e'^2\right]\Psi = 0 \tag{12}$$

を得る。Dirac 方程式の無次元化方程式化（Schorödinger や Klein–Gordon に合わせて二階の方程式とした）については付録で導出を行うが、

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} - \frac{\boldsymbol{L}^2 - \alpha^2 - \mathrm{i}\alpha\rho_1\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{r}}}{r^2} + \frac{2E'\alpha}{r} + E'^2 - m_e'^2\right]\Psi = 0 \tag{13}$$

のようになる。ここで、ϵ_{ijk} を Levi-Civita 記号として、角運動量演算子 L_i [*1]

$$L_i = \frac{1}{\mathrm{i}}\epsilon_{ijk}x_j\frac{\partial}{\partial x_k} \tag{14}$$

導入した。各方程式中では角運動量演算子の自乗

$$\boldsymbol{L}^2 = L_1^2 + L_2^2 + L_3^2 \tag{15}$$

として登場する。

2.3 束縛状態のエネルギー

2.3.1 Schrödinger 方程式

角運動量演算子 L_1, L_2, L_3 が方程式を不変にすることを利用する。すなわち、L_1, L_2, L_3 がなす $\mathfrak{so}(3)$ 代数のカシミール元 $\boldsymbol{L}^2$ と方程式は同時対角化できる。

カシミール元 $\boldsymbol{L}^2$ の固有値は $l \in \mathbb{Z}_{\geq 0}$ として $l(l+1)$ となる。これを用いると動径変数に関する常微分固有方程式

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{d}{dr} - \frac{l(l+1)}{r^2} + \frac{2m_e'\alpha}{r} + 2E'm_e'\right]R_l = 0 \tag{16}$$

を得る。

関数

$$\varphi_l(r) = rR_l(r) \tag{17}$$

---

*1 次元としては物理的な角運動量を $\hbar$ で割ったものなので無次元。

を導入すると、

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} + \frac{2m'_e\alpha}{r} + 2E'm'_e\right]\varphi_l(r) = 0 \tag{18}$$

のように、一回微分の項を消去することが出来る。

付録で導出される離散化条件 189 を用いると、$n \in \mathbb{Z}_+$ として、

$$2m'_e\alpha/\sqrt{4(-2E'm_e)} - l - 1 = n - 1 \tag{19}$$

が成立する必要がある。

したがって、

$$E' = -m'_e\frac{\alpha^2}{2(n+l)^2} \tag{20}$$

となる。ここで主量子数

$$N = n + l \tag{21}$$

を導入すると、

$$E' = -m'_e\frac{\alpha^2}{2N^2} \tag{22}$$

となる。すなわち、エネルギーに角運動量量子数は陽には出てこない。これが非相対論的水素原子における偶然縮退と呼ばれるものである。

2.3.2 Klein–Gordon 方程式

Klein–Gordon 方程式についても角運動量演算子の作用について不変なので同様の方針で良い。すなわち、カシミール元 $\boldsymbol{L}^2$ の各固有値 $l(l+1)$ に対して、動径変数に関する常微分固有方程式

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} - \frac{l(l+1)-\alpha^2}{r^2} + \frac{2E'\alpha}{r} + (E'^2 - m'^2_e)\right]R_l(r) = 0 \tag{23}$$

を得る。

ここで、

$$l'(l'+1) = l(l+1) - \alpha^2 \tag{24}$$

を満たす実数 l' には一般には二つあるが以下ではそのうちの大きい方を考える。[*2]すなわち、

$$l' = -\frac{1}{2} + \sqrt{\left(l+\frac{1}{2}\right)^2 - \alpha^2} \tag{25}$$

[*2] 暗に $0 < \alpha < 1$ を用いている。

とすると、

$$\left[\frac{d^2}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{d}{dr}-\frac{l'(l'+1)}{r^2}+\frac{2E'\alpha}{r}+E'^2-m_e'^2\right]R_l(r)=0 \tag{26}$$

という方程式を得る。

関数

$$\varphi_l(r)=rR_l(r) \tag{27}$$

を導入すると、

$$\left[\frac{d^2}{dr^2}-\frac{l'(l'+1)}{r^2}+\frac{2E'\alpha}{r}+(E'^2-m_e'^2)\right]\varphi_l(r)=0 \tag{28}$$

のように一階微分の項が消去される。

付録で導出される離散化条件 189 を用いると、$n\in\mathbb{Z}_+$ として、

$$2E'\alpha/\sqrt{4(m_e'^2-E'^2)}-l'-1=n-1 \tag{29}$$

が成立する必要がある。

ここから、

$$E'=\frac{m_e'}{\sqrt{1+\frac{\alpha^2}{\left(n-\frac{1}{2}+\sqrt{(l+\frac{1}{2})^2-\alpha^2}\right)^2}}}\simeq m_e'\left(1-\frac{\alpha^2}{2N^2}-\frac{\alpha^4}{N^3(2l+1)}\right) \tag{30}$$

となる。

この場合も

$$N=n+l\geq 1 \tag{31}$$

を主量子数という。

2.3.3 Dirac 方程式

四元スピノールの波動方程式になっているところが、前二者と比較して少し扱いづらい。全角運動量

$$\boldsymbol{J}=\boldsymbol{L}+\frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma} \tag{32}$$

が波動方程式 13 を与える線形演算子と可換であることを用いる。ここで、

$$\Gamma=-(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L}+1)+\mathrm{i}\alpha\rho_1\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{r}} \tag{33}$$

を導入すると

$$(\Gamma+1)\,\Gamma=\boldsymbol{L}^2-\alpha^2-\mathrm{i}\alpha\rho_1\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{r}} \tag{34}$$

である。これは式 13 で出てくる第三項の分子に他ならない。さらに $\boldsymbol{J}^2, \boldsymbol{L}^2$ の固有値が $j(j+1), l(l+1)$ の時、

$$\Gamma^2 = (\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L}+1)^2 - \alpha^2 = \left(j(j+1) - l(l+1) + \frac{1}{4}\right)^2 - \alpha^2 \tag{35}$$

となる。

ここで、$j = l \pm \frac{1}{2}$[*3]のいずれかであるから、それぞれの場合について

$$\Gamma^2 = \left(l + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2}\right)^2 - \alpha^2 \tag{36}$$

となる。

ここで、

$$\left[\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{r}}, \frac{\partial}{\partial r}\right] = \left[\boldsymbol{L}^2, \frac{\partial}{\partial r}\right] = 0 \tag{37}$$

を用いると Γ と式 13 を与える線形演算子を同時対角化する表示を採用できる。

このとき Γ の固有値は

$$\pm\sqrt{\left(l + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2}\right)^2 - \alpha^2} \tag{38}$$

であるが、正の方を γ とする。

今考えている部分空間（$\boldsymbol{J}^2, \boldsymbol{L}^2$ が $j(j+1), l(l+1), j = l \pm \frac{1}{2}$ となる部分空間を考えている）では動径方向の方程式

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{d}{dr} - \frac{\gamma(\gamma+1)}{r^2} + \frac{2E'\alpha}{r} + E'^2 - m_e'^2\right] R_l(r) = 0 \tag{39}$$

を考えれば良い。

付録で導出される離散化条件 189 を用いると、$n \in \mathbb{Z}_+$ として、

$$2E'\alpha/\sqrt{4(m_e'^2 - E'^2)} - \gamma - 1 = n - 1 \tag{40}$$

が成立する必要がある。

ここから、

$$E' = \frac{m_e'}{\sqrt{1 + \frac{\alpha^2}{\left(n + \sqrt{\left(l+\frac{1}{2}\pm\frac{1}{2}\right)^2 - \alpha^2}\right)^2}}} \simeq m_e'\left(1 - \frac{\alpha^2}{2N^2} - \frac{\alpha^4}{2N^3(l + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2})}\right) \tag{41}$$

となる。

この場合も

$$N = n + l \geq 1 \tag{42}$$

を主量子数という。

---

*3 $j = l + \frac{1}{2}$ の時は $l \in \mathbb{Z}_{\geq 0}$、$j = l - \frac{1}{2}$ のときは $l \in \mathbb{Z}_{>0}$ である。これにより $0 < \alpha < 1$ ならば $\gamma \in \mathbb{R}$ が保証される。

3　$\mathcal{N}=2$ 超対称性量子力学

3.1　$\mathcal{N}=2$ 超対称性ハミルトニアンと $\mathcal{N}=2$ 超対称性代数

次の様なハミルトニアンを考える。

$$H = \begin{pmatrix} H_1 & 0 \\ 0 & H_2 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} E & 0 \\ 0 & E \end{pmatrix} \tag{43}$$

ただし、$A, A^\dagger \in L^2(\boldsymbol{R})$ を共役な一階の微分演算子の組みとして、

$$H_1 = A^\dagger A, \tag{44}$$

$$H_2 = AA^\dagger \tag{45}$$

と書けるものとする。考えているヒルベルト空間は

$$\mathcal{H}_{fb} = L^2(\mathbb{R}) \oplus L^2(\mathbb{R}) \tag{46}$$

というものになる。

ここで、二つの共役な演算子

$$Q = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ A & 0 \end{pmatrix}, \tag{47}$$

$$Q^\dagger = \begin{pmatrix} 0 & A^\dagger \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \tag{48}$$

を定義すると反交換ブラケット $\{\cdot,\cdot\}$[*4] を用いて、

$$\{Q, Q\} = 0 \tag{49}$$

$$\left\{Q^\dagger, Q^\dagger\right\} = 0 \tag{50}$$

$$\left\{Q, Q^\dagger\right\} = H - E \tag{51}$$

などが成立する。そして、

$$Q^2 = \left(Q^\dagger\right)^2 = 0 \tag{52}$$

である。

したがって、

$$H = \left(Q + Q^\dagger\right)^2 + E \tag{53}$$

と書くことが可能である。この様なハミルトニアンを $\mathcal{N}=2$ 超対称性ハミルトニアンと呼ぶ。

ここで、

$$Q_1 = Q + Q^\dagger \tag{54}$$

$$Q_2 = \mathrm{i}(Q - Q^\dagger) \tag{55}$$

---

*4 反交換ブラケット $\{\cdot,\cdot\}$ は、$\{A, B\} = AB + BA$ なる双線形な二項演算子である。

とすると、

$$Q_1^2 = Q_2^2 = H - E \tag{56}$$

$$[Q_1, H] = [Q_2, H] = 0 \tag{57}$$

$$\{Q_1, Q_2\} = 0 \tag{58}$$

となる。すなわち、Q_1, Q_2 は超対称性ハミルトニアンと可換であり、supercharge と呼ばれるものである。この Q_1, Q_2 が生成する代数を $\mathcal{N} = 2$ 超対称性代数と呼ぶ。

3.2 フェルミオン演算子を用いた表示

行列で定義される次の演算子

$$f = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \tag{59}$$

$$f^\dagger = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \tag{60}$$

を導入する。これらの間には

$$\{f, f^\dagger\} = 1 \tag{61}$$

$$\{f, f\} = 0 \tag{62}$$

$$\{f^\dagger, f^\dagger\} = 0 \tag{63}$$

という関係式が成立し、

$$f^2 = \left(f^\dagger\right)^2 = 0 \tag{64}$$

となる。ここで f を**フェルミオンの消滅演算子**、$f^\dagger$ を**フェルミオンの生成演算子**と呼び、合わせて**フェルミオンの演算子**と呼ぶ。

これらを用いると、

$$Q = Af \tag{65}$$

$$Q^\dagger = A^\dagger f^\dagger \tag{66}$$

が成立し、先に導入した式 43 の超対称性ハミルトニアンは

$$H = \left(Af + A^\dagger f^\dagger\right)^2 + E \tag{67}$$

と書けることがわかる。

3.3　フェルミオンのフォック空間

フェルミオンのフォック空間 $\mathcal{H}_f$ は、フェルミオンが 1 つある状態 $|1\rangle$ と 1 つもない状態 $|0\rangle$ の実係数線形結合からなるヒルベルト空間である。すなわち、

$$\mathcal{H}_f = \{c_0|0\rangle + c_1|1\rangle \mid |c_0|^2 + |c_1|^2 = 1, c_0, c_1 \in \mathbb{R}\} \tag{68}$$

である。ここで、

$$|0\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \tag{69}$$

$$|1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \tag{70}$$

と見なすことができる。すなわち、

$$f^\dagger|1\rangle = 0 \tag{71}$$

$$f^\dagger|0\rangle = |1\rangle \tag{72}$$

$$f^\dagger|0\rangle = 0 \tag{73}$$

$$f^\dagger|1\rangle = |0\rangle \tag{74}$$

が成立し、$f^\dagger$ がフェルミオン一つを生成する働き、f がフェルミオン一つを消滅する働き、をそれぞれすることが確認できる。

さらに $f^\dagger f$ はフェルミオンの個数演算子の役割を持つ。すなわち、個数演算子は

$$\langle 0|f^\dagger f|0\rangle = 0 \tag{75}$$

$$\langle 1|f^\dagger f|1\rangle = 1 \tag{76}$$

のようにフェルミオンの個数を与える。

元のハミルトニアンで考えていたヒルベルト空間 $\mathcal{H}_{fb}$ とフォック空間 $\mathcal{H}_f$ の関係は

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{fb} &= L^2(\boldsymbol{R}) \otimes_{\mathbb{R}} \mathcal{H}_f \\ &= \{f|0\rangle + b|1\rangle \mid \|f\|^2 + \|b\|^2 = 1, f, b \in L^2(\mathbb{R})\} \end{aligned} \tag{77}$$

となり、テンソル積で前者が構成されるような関係にある。

超対称性ハミルトニアンは

$$\begin{aligned} H &= \left(Af + A^\dagger f^\dagger\right)^2 + E \\ &= AA^\dagger f f^\dagger + A^\dagger A f^\dagger f + E \\ &= AA^\dagger \left(1 - f^\dagger f\right) + A^\dagger A f^\dagger f + E \end{aligned} \tag{78}$$

と変形できるので、$f^\dagger f$ と可換である。したがって、上記の個数演算子 $f^\dagger f$ と超対称性ハミルトニアン H は同時対角化可能であり、縮退した状態が現れることが期待される。実際に縮退を確認できる。

まず、同時対角化可能であることから、あるエネルギー固有状態は $f^\dagger f$ の固有状態でもあり、例えばそれはフェルミオンがない固有状態であるとすることができる。このような状態があることを仮定しこれを $|b\rangle$ として、

$$|b\rangle = b(x)|0\rangle \tag{79}$$

と表されてエネルギーが ϵ_b とする。ここで

$$|f\rangle = A^\dagger f^\dagger |b\rangle = A^\dagger b(x)|1\rangle \tag{80}$$

とすると、

$$\begin{aligned}
H|f\rangle &= (A^\dagger A f^\dagger f + E)A^\dagger f^\dagger b(x)|0\rangle \\
&= A^\dagger f^\dagger (AA^\dagger f f^\dagger + E)b(x)|0\rangle \\
&= A^\dagger f^\dagger (A^\dagger A f^\dagger f + AA^\dagger f f^\dagger + E)b(x)|0\rangle \\
&= A^\dagger f^\dagger H|b\rangle \\
&= \epsilon_b |f\rangle
\end{aligned} \tag{81}$$

となり、$|f\rangle$ はエネルギーが $|b\rangle$ と同じとなる H の固有状態であることがわかる。両者は直交する異なる状態であるが縮退しているのである。このような $f^\dagger f$ との可換性に基づく対称性が**超対称性**である。上の例では、$|f\rangle$ はフェルミオン的状態、$|b\rangle$ はボソン的状態と呼ばれる。

また、$|\psi\rangle \in \mathcal{H}_{fb}$ とすると、

$$\langle \psi \mid H \mid \psi \rangle = \|A^\dagger f^\dagger |\psi\rangle\|^2 + \|Af|\psi\rangle\|^2 + E \geq E \tag{82}$$

が成立しており、エネルギーの下限は E で与えられる。

ここで、上記の $|b\rangle, |f\rangle$ の組が存在する条件を考える。まず、上記の $|f\rangle, |b\rangle$ を使って

$$\begin{aligned}
\langle f|f\rangle &= \langle b|AA^\dagger f f^\dagger|b\rangle \\
&= \langle b|H - E|b\rangle \\
&= \epsilon_b - E
\end{aligned} \tag{83}$$

という式が成立することが確かめられる。したがって、上記の組が存在するためには

$$\epsilon_b > E \tag{84}$$

となる必要がある。

では、下限のエネルギー E を取るような状態はあるのか、そもそもどうなっているのだろうか？ハミルトニアンと個数演算子は同時対角化可能なので、このような状態があるとすると、フェルミオン的かボソン的かのいずれかである。前者を仮に $f_0(x)|1\rangle$ とし、後者を仮に $b_0(x)|0\rangle$ とする。エネルギーが E となるためには、前者が解であれば、

$$Af_0 = 0 \tag{85}$$

後者が解であれば、

$$A^\dagger b_0 = 0 \tag{86}$$

が成立する必要がある。実際のところ何個 E のエネルギーを取るボソン的状態あるいはフェルミオン的状態が存在するかは $A, A^\dagger$、すなわちポテンシャル形状に依存する。両者の数の差を

$$\Delta = n_b - n_f \tag{87}$$

定義したとき、これは **Witten 指数**と呼ばれる量となる。

4　非相対論的水素原子に潜む $\mathcal{N} = 2$ 超対称性

二種類の意味で超対称性が存在する。

4.1　スピンが関わらない超対称性

Schrödinger 方程式を解く過程で出てくる $\psi_l(r) = rR_l(r)$ に関する固有値方程式

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} + \frac{2\alpha m_e'}{r} + 2E_l' m_e'\right]\psi_l(\boldsymbol{r}) = 0 \tag{88}$$

を考える。このとき、

$$H_l(r) = -\frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{2\alpha m_e'}{r} \tag{89}$$

とおけば、

$$H_l(r)R_l(r) = 2E_l' m_e' \psi_l(r) =: \epsilon_l \psi_l(r) \tag{90}$$

と書ける。以下、この固有値方程式における束縛状態のエネルギーを求めることを考える。

4.1.1　因数分解を利用した解法

この節では、

$$H_l(r) = a_l^\dagger a_l + c_l \tag{91}$$

c_l はスカラーという形式に書き換えることを考える。a_l は一回微分を含む演算子であり、$a_l^\dagger$ はその共役演算子である。

これは可能であり、

$$a_l = \frac{d}{dr} + \frac{l}{r} - \frac{\alpha m_e'}{l} \tag{92}$$

$$a_l^\dagger = -\frac{d}{dr} + \frac{l}{r} - \frac{\alpha m_e'}{l} \tag{93}$$

$$c_l = -\left(\frac{\alpha m_e'}{l}\right)^2 \tag{94}$$

により達成される。($l \geq 1$ で成立している。)

一方、別の書き換えをすることができる。それを見よう。昇降演算子と呼ばれるゆえんが見えてくる。

まず、$a_l, a_l^\dagger$ の交換関係は、

$$[a_l, a_l^\dagger] = -\frac{2l}{r^2} \tag{95}$$

となることから、

$$\begin{aligned} a_l a_l^\dagger &= a_l^\dagger a_l - \frac{2l}{r^2} \\ &= H_l(r) - c_l - \frac{2l}{r^2} \\ &= H_{l-1}(r) - c_l \end{aligned} \tag{96}$$

となり、(ただし、$l \geq 1$)

$$H_{l-1}(r) = a_l a_l^\dagger + c_l \tag{97}$$

が成立する。したがって、$l \geq 1$ で、

$$H_l(r) = a_{l+1} a_{l+1}^\dagger + c_{l+1} = a_l^\dagger a_l + c_l \tag{98}$$

となる。ただし、式 98 の最初の等式に付いては $l = 0$ でも成立している。

角運動量量子数 $l \geq 1$ に対応する解が

$$H_l \psi_{l,k} = \epsilon_{l,k} \psi_{l,k} \tag{99}$$

のように与えられたとする。

このとき、

$$\begin{aligned} H_{l+1} a_{l+1}^\dagger \psi_{l,k} &= \left[a_{l+1}^\dagger a_{l+1} + c_{l+1} \right] a_{l+1}^\dagger \psi_{l,k} \\ &= \left[a_{l+1}^\dagger (\mathcal{H}_l - c_{l+1}) + c_{l+1} a_{l+1}^\dagger \right] \psi_{l,k} \\ &= \epsilon_{l,k} a_{l+1}^\dagger \psi_{l,k} \end{aligned} \tag{100}$$

が成立する。

この等式より、$a_{l+1}^\dagger \psi_{l,k} = 0$ でなければ $a_{l+1}^\dagger \psi_{l,k}$ が角運動量量子数 $l+1$ に対応する解となり、かつ、ψ_l と同じエネルギー $\epsilon_{l,k}$ を持つことが分かる。すなわち、$a_l^\dagger$ は角運動量量子数に関する上昇演算子(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、

$$\begin{aligned} H_{l-1} a_l \psi_{l,k} &= \left[a_l a_l^\dagger + c_l \right] a_l \psi_{l,n} \\ &= \left[a_l (H_l - c_l) + c_l a_l \right] \psi_{l,k} \\ &= \epsilon_{l,k} a_l \psi_{l,k} \end{aligned} \tag{101}$$

この等式より、$a_l\psi_{l,k}=0$ でなければ $a_l\psi_{l,k}$ が角運動量量子数 $l-1$ に対応する解となり、かつ、ψ_l と同じエネルギー $\epsilon_{l,k}$ を持つことが分かる。すなわち、a_l は角運動量量子数に関する下降演算子（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。

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。（a_l は $l=0$ で定義不能である。）

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

$$H_l\psi=\left[a_{l+1}a_{l+1}^\dagger+c_{l+1}\right]\psi=c_{l+1}\psi \tag{102}$$

となり、対応する固有値は

$$c_{l+1}=-\frac{1}{(l+1)^2}\left(\frac{\kappa m_e}{\hbar^2}\right)^2 \tag{103}$$

となる。この ψ を $\psi_{l,0}$ とすると、

$$\psi_{l,0}\propto r^{l+1}e^{-\frac{r}{l+1}\frac{\kappa m_e}{\hbar^2}} \tag{104}$$

がその関数形である。対応するエネルギーは、

$$E_{l,0}=-\frac{1}{2(l+1)^2}\frac{\kappa^2 m_e}{\hbar^2} \tag{105}$$

である。自明なことであるが、l が異なれば $E_{l,0}$ は異なる。

縮退している状態の数は以下のようにして分かる。上記の状態に降演算子を作用させることで、縮退しているが異なる角運動量量子数を持つ状態 $a_l\psi_{l,0},\ a_{l-1}a_l\psi_{l,0},\ \cdots,\ a_1\cdots a_{l-1}a_l\psi_{l,0}$ を得ることができる。

それぞれの状態の縮退数はスピンを考慮しない場合、$2l+1, 2l-1,\cdots,1$ となる。したがって、スピンを考慮しない縮退数は

$$\sum_{m=0}^{l}(2m+1)=l(l+1)+l+1=(l+1)^2 \tag{106}$$

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。

4.1.2　$\mathcal{N}=2$ 超対称性ハミルトニアンと supercharge の構成

式 89 で出てきた動径部分ハミルトニアンのうち、l と $l-1$ のものを全てまとめ上げたハミルトニアン $\mathcal{H}_l(r)$ を考える。（$l\geq 1$ とする。）すなわち、

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_l(r)&=\begin{pmatrix}H_l(r)&0\\0&H_{l-1}(r)\end{pmatrix}\\&=\begin{pmatrix}a_l^\dagger a_l&0\\0&a_l a_l^\dagger\end{pmatrix}+\begin{pmatrix}c_l&0\\0&c_l\end{pmatrix}\end{aligned} \tag{107}$$

とおく。このハミルトニアンは明らかに前節で出てきた超対称性ハミルトニアンと同じ形をしている。

ここで、

$$Q = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ a_l & 0 \end{pmatrix} \tag{108}$$

$$Q^\dagger = \begin{pmatrix} 0 & a_l^\dagger \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \tag{109}$$

$$\tag{110}$$

とおくと

$$H - E = \left(Q + Q^\dagger\right)^2 \tag{111}$$

となり、

$$Q_1 = Q + Q^\dagger \tag{112}$$

$$Q_2 = \mathrm{i}(Q - Q^\dagger) \tag{113}$$

とすると、これらは supercharge となる。

4.2 スピンが関わる超対称性

この節は Tangerman–Tjon の議論 [33] に従う。次章において Dirac 方程式に潜む超対称性を考えるにあたってとても参考になるものである。

Schrödinger 方程式

$$\left(-\frac{\nabla^2}{2m_e} - \frac{\kappa}{r}\right)\Psi = E\Psi \tag{114}$$

にスピン 1/2 の自由度を入れた方程式を考える。[*5]ただし、特に新たな相互作用の項を入れないものとする。この時、得られるスペクトルは変わらない。

4.2.1 準備

演算子 K を

$$K = -\left(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L} + 1\right) = -\left(2\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{L} + 1\right) \tag{115}$$

で定義する。[*6]$\boldsymbol{S}, \boldsymbol{\sigma}$ はスピン演算子、パウリ行列を表し、

$$\boldsymbol{S} = \frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma} \tag{116}$$

の関係がある。

---

*5 $\hbar = 1$ とする。

*6 これは次節で出てくる Dirac 演算子と関係がある。

　また、Laplace–Runge–Lenz ベクトルを

$$\mathbf{A} = \frac{1}{2m_e}(\mathbf{p} \times \mathbf{L} - \mathbf{L} \times \mathbf{p}) - \frac{\kappa \mathbf{x}}{r} \tag{117}$$

で定義する。すると、角運動量ベクトル、Laplace–Runge–Lenz ベクトルの各成分間の交換関係は

$$[L_i, L_j] = \mathrm{i}\epsilon_{ijk} L_k \tag{118}$$

$$[L_i, A_j] = \mathrm{i}\epsilon_{ijk} A_k \tag{119}$$

$$[A_i, A_j] = -\mathrm{i}\frac{2H}{m_e}\epsilon_{ijk} L_k \tag{120}$$

のようになる。　さらに

$$[K, H] = [\boldsymbol{A}, H] = [\boldsymbol{L}, H] = 0 \tag{121}$$

が成立し、$K, \boldsymbol{A}, \boldsymbol{L}$ といった量はハミルトニアンと可換である。このほかに

$$\mathbf{A}^2 = 2\frac{H}{m_e}\left(\mathbf{L}^2 + 1\right) + \kappa^2 \tag{122}$$

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{L} = \mathbf{L} \cdot \mathbf{A} = 0 \tag{123}$$

といった関係式が成立する。

4.2.2　$\mathcal{N} = 2$ 超対称性ハミルトニアンと supercharge の構成

　以上の準備を用いると、

$$(\mathbf{S} \cdot \mathbf{A})^2 = \frac{1}{2}HK^2 + \frac{1}{4} \tag{124}$$

が成立する。

　演算子 K とハミルトニアン H は可換なので両者が対角化されるような表示を考えることができる。ここで K の固有値が k となるような部分ヒルベルト空間を考える。そのような部分空間において

$$2\left(\frac{\mathbf{S} \cdot \mathbf{A}}{k}\right)^2 = H + \frac{1}{2k^2} \tag{125}$$

が成立する。ここで

$$\mathcal{H} = H + \frac{1}{2k^2} \tag{126}$$

$$Q_1 = Q_1 \equiv \frac{\mathbf{S} \cdot \mathbf{A}}{k} \tag{127}$$

$$Q_2 = \mathrm{i}AP_k = \mathrm{i}A\frac{K}{k} \tag{128}$$

とすると、

$$Q_1^2 = Q_2^2 = \mathcal{H} \tag{129}$$

$$[Q_1,\mathcal{H}]=[Q_2,\mathcal{H}]=0 \tag{130}$$

$$\{Q_1,Q_2\}=0 \tag{131}$$

が成立する。すなわちハミルトニアン $\mathcal{H}$ を $\mathcal{N}=2$ 超対称性ハミルトニアン、Q_1,Q_2 を二つの supercharge と見ることができる。

昇降演算子

$$Q_\pm=\frac{1}{2}(Q_1\pm \mathrm{i}Q_2) \tag{132}$$

を定義する。

5 相対論的水素原子に潜む $\mathcal{N}=2$ 超対称性

この章は Katsura–Aoki の議論 [35] に従う。ここでは一般 $D+1$ 次元 Dirac 方程式を考える。原子単位系 $c=\hbar=1$ を採用すると、Dirac 方程式は

$$\left[\gamma^0(p_0-V)+\gamma^i p_i-m_e\right]\Psi=0 \tag{133}$$

と書ける。ここで第二項において $i=1,2,\cdots,D$ であり、Einstein の縮約記法を用いている。また、$\{\gamma^0,\gamma^1,\cdots,\gamma^D\}$ はクリフォード代数 $Cl(1,D)$ の生成元であり、

$$\{\gamma^\mu,\gamma^\nu\}=2g^{\mu\nu}=\mathrm{diag}(+1,-1,-1,\cdots,-1) \tag{134}$$

を満たす。$D+1$ 元運動量

$$p_\mu=\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial x^\mu} \tag{135}$$

について $p_0=p^0=H$ とすれば、非時間依存 Dirac 方程式を得ることができる。$p_i=-p^i$ を用いると、非時間依存 Dirac 方程式は

$$H\Psi=(\gamma^0\gamma^i p^i+m_e\gamma^0+V)\Psi \tag{136}$$

と書くことができる。この H を Dirac ハミルトニアンと呼ぶ。以下、V を球対称ポテンシャルとする。

5.1 球対称ポテンシャル下の Dirac 方程式の対称性

■回転対称性 $\mathfrak{so}(D)$

全角運動量テンソルを次のように定義する。

$$J^{ij}=L^{ij}+\frac{\mathrm{i}}{2}\gamma^i\gamma^j \tag{137}$$

ただし、軌道角運動量テンソルを $L^{ij}=x^ip^j-x^jp^i$ とした。第二項はスピン角運動量テンソルである。

すると、

$$\left[\gamma^i\gamma^j,\gamma^k\gamma^l\right]=2\left(\delta_{ik}\gamma^j\gamma^l-\delta_{il}\gamma^j\gamma^k-\delta_{jk}\gamma^i\gamma^l+\delta_{jl}\gamma^i\gamma^k\right) \tag{138}$$

$$\left[L^{ij},L^{kl}\right]=\mathrm{i}\left(\delta_{ik}L^{jl}-\delta_{il}L^{jk}-\delta_{jk}L^{il}+\delta_{jl}L^{ik}\right) \tag{139}$$

より、

$$\left[J^{ij},J^{kl}\right]=\mathrm{i}\left(\delta_{ik}J^{jl}-\delta_{il}J^{jk}-\delta_{jk}J^{il}+\delta_{jl}J^{ik}\right) \tag{140}$$

となることがわかる。したがって、$\{\mathrm{i}J^{ij}\}$ はリー代数 $\mathfrak{so}(D)$ を生成することがわかる。

J^{ab} は H と可換であることが示せる。

$$\left[J^{ab},V(r)\right]=\left[J^{ab},\gamma^0\right]=0 \tag{141}$$

はすぐにわかる。また、

$$\left[\gamma^a\gamma^b,\gamma^0\gamma^i\right]=2\gamma^0(\gamma^b\delta^{ia}-\gamma^a\delta^{ib}) \tag{142}$$

$$\left[L^{ab},p^i\right]=\mathrm{i}(\delta^{ia}p^b-\delta^{ib}p^a) \tag{143}$$

·を用いると、

$$\left[J^{ab},\gamma^0\gamma^i p^i\right]=\gamma^0\gamma^i\left[L^{ab},p^i\right]+\frac{\mathrm{i}}{2}p^i\left[\gamma^a\gamma^b,\gamma^0\gamma^i\right]=0 \tag{144}$$

がわかる。

$$S^2:=\frac{1}{2}\sum_{a\neq b}\left(\frac{\mathrm{i}}{2}\gamma^a\gamma^b\right)^2=\frac{D(D-1)}{8} \tag{145}$$

■パリティ対称性 $\mathbb{Z}_2$

Dirac 作用素

$$K=\gamma^0\left\{\frac{\mathrm{i}}{2}\sum_{a\neq b}\gamma^a\gamma^b L^{ab}+\frac{1}{2}(D-1)\right\} \tag{146}$$

と定義する。

$$\left[\gamma^0\gamma^a\gamma^b,\gamma^0\right]=\left[\gamma^0\gamma^a\gamma^b,V(r)\right]=0 \tag{147}$$

は直ちにわかる。

また、

$$\left[\gamma^0,\gamma^0\gamma^i p^i\right]=2\gamma^i p^i \tag{148}$$

$$\left[\gamma^0 \sum_{a\neq b} \gamma^a\gamma^b L^{ab}, \gamma^0\gamma^i p^i\right] = 2(D-1)\mathrm{i}\gamma^i p^i \tag{149}$$

と合わせることで、

$$\left[K, \gamma^0\gamma^i p^i\right] = 0 \tag{150}$$

がわかる。以上より Dirac ハミルトニアン H と Dirac 作用素 K が可換であり、

$$[K, H] = 0 \tag{151}$$

が成立する。

ここで、

$$P_K = K/|K| \tag{152}$$

で定義される K の既約部分空間ごとに作用する作用素をパリティ演算子という。パリティ演算子についても

$$[P_K, H] = 0 \tag{153}$$

が成立する。

5.2 クーロンポテンシャル下の $\mathcal{N} = 2$ 超対称性

クーロンポテンシャル下ではパリティ対称性や $\mathfrak{so}(D)$ 対称性以外の対称性があることがわかる。それを $3+1$ 次元 Dirac 方程式で初めて見つけたのは Johnson と Lippmann である。[*7]これは非相対論的水素原子における隠れた対称性を記述するために必要となる Laplace–Runge–Lenz–Pauli ベクトルの相対論版とも言うべきものである。

ここでは Katsura と Aoki が行なった一般次元拡張版を紹介する。[*8]

■Johnson–Lippmann–Katsura–Aoki 演算子の導入

ここでは天下り的に Johnson–Lippman–Katsura–Aoki 演算子を与え、それが Dirac ハミルトニアンと可換であることを示す。ポテンシャルがクーロン型であるとする。すなわち、

$$V(r) = -\frac{\alpha}{r} \tag{154}$$

とする。

この時、Johnson–Lippmann–Katsura–Aoki 演算子を

$$A := \gamma^{D+1}\gamma^0\gamma^i\frac{x^i}{r} - \frac{\mathrm{i}}{m_e\alpha}K\gamma^{D+1}(H - \gamma^0 m_e) \tag{155}$$

[*7] この対称性の生成元を Johnson–Lippmann 演算子と呼ぶがその導出方法を示した論文 [36] がある。

[*8] こちらについては Johnson–Lippmann 演算子をクリフォード代数の知識を用いることで自然な一般化を図ったものなので、Johnson–Lippnmann 演算子を思いつく時の苦労よりは少ないと考えられる。

で定義する。ここで、γ^{D+1} はクリフォード代数の構成要素であって

$$\gamma^{D+1} = \left(\gamma^{D+1}\right)^{\dagger}, \left(\gamma^{D+1}\right)^{2} = 1, \left\{\gamma^{D+1}, \gamma^{\mu}\right\} = 0 \tag{156}$$

を満たすものである。

Johnson–Lippmann–Katsura–Aoki 演算子と Dirac ハミルトニアンが可換であること、すなわち

$$[A, H] = 0 \tag{157}$$

については計算で示すことができる。

■$\mathcal{N} = 2$ 超対称性ハミルトニアンと supercharge の構成

二つの関係式

$$A^2 = 1 + \left(\frac{K}{\alpha}\right)^2 \left(\frac{H^2}{m_e^2} - 1\right) \tag{158}$$

$$\{K, A\} = 0 \tag{159}$$

が成立することが計算で確かめることができる。

ここで、

$$\mathcal{H} = A^2 \tag{160}$$

$$Q_1 = A \tag{161}$$

$$Q_2 = \mathrm{i} A P_K \tag{162}$$

とすると、

$$Q_1^2 = Q_2^2 = \mathcal{H} \tag{163}$$

$$[Q_1, \mathcal{H}] = [Q_2, \mathcal{H}] = 0 \tag{164}$$

$$\{Q_1, Q_2\} = 0 \tag{165}$$

が成立する。すなわちハミルトニアン $\mathcal{H}$ を $\mathcal{N} = 2$ 超対称性ハミルトニアン、Q_1, Q_2 を二つの supercharge と見ることができる。

6 最後に

本ノートでは非相対論的水素原子と相対論的水素原子に潜む $\mathcal{N} = 2$ 超対称性について紹介した。この対称性に対応した代数である $\mathcal{N} = 2$ SUSY 代数を用いることで、波動関数を代数的に取り扱うことが可能である。

最後に実際の水素原子では核磁性を原因とする超微細構造相互作用や原子核のサイズ効果や量子電磁気力学効果による Lamb シフト等を原因としてこの超対称性が破れていることを指摘しておく。このような Dirac 方程式を超えた効果について詳しい論文 [39–41] がある。

参考文献

[1] Johann Jakob Balmer. “Notiz über die Spectrallinien des Wasserstoffs.” Annalen der Physik 261.5 (1885): 80-87.

[2] Niels Bohr. “Rydberg’s discovery of the spectral laws”, in Kalckar, J., N. Bohr: Collected Works, 10, Amsterdam: North–Holland Publ. (1985): 373–379.

[3] Theodore Lyman. “The Spectrum of Hydrogen in the Region of Extremely Short Wave–Length”, Memoirs of the American Academy of Arts and Sciences, New Series, 13 (3) (1906): 125–146

[4] Friedrich Paschen.“Zur Kenntnis ultraroter Linienspektra. I.”, Annalen der Physik, 332 (13) (1908): 537–570

[5] Frederick Sumner Brackett. ”Visible and Infra–Red Radiation of Hydrogen”, Astrophysical Journal, 56 (1922): 154

[6] A. H. Pfund. “The emission of nitrogen and hydrogen in infrared”, J. Opt. Soc. Am., 9 (3) (1924): 193–196

[7] Humphreys, C.J. (1953), ”The Sixth Series in the Spectrum of Atomic Hydrogen”, J. Research Natl. Bur. Standards, 50

[8] A. A. Michelson and E. W. Morley, Amer. J. Sci. 34, 427 (1887); Phil Mag. 24, 463. (1887).

[9] Niels Bohr. “On the Constitution of Atoms and Molecules”, Phil. Mag.. Series 6 26 (151). (1913).: 1–25.

[10] Niels Bohr. “On the Constitution of Atoms and Molecules, Part II, Systems Containing Only a Single Nucleus”, Phil. Mag.. Series 6 26. (1913): 476–502.

[11] Niels Bohr. “On the Constitution of Atoms and Molecules, Part III, Systems containing several nuclei”. Phil. Mag.. Series 6 26. (1913): 857–875.

[12] Arnold Sommerfeld. “Zur quantentheorie der spektrallinien.” Annalen der Physik 356.17 (1916): 1–94, 125–167.

[13] E. Schrödinger. “Quantisierung als Eigenwertproblem; von Erwin Schrödinger”. Annalen der Physik. 384. (1926): 361–377.

[14] Vladimir Fock. ”Zur schrödingerschen wellenmechanik.” Zeitschrift für Physik A Hadrons and Nuclei 38.3 (1926): 242–250.

[15] Oskar Klein. “Elektrodynamik und wellenmechanik vom standpunkt des korrespondenzprinzips.” Zeitschrift für Physik A Hadrons and nuclei 41.6–7 (1927): 407–442.

[16] Walter Gordon. “Der comptoneffekt nach der schrödingerschen theorie.” Zeitschrift für Physik 40.1–2 (1926): 117–133.

[17] Paul Dirac. “The quantum theory of the electron.” Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character 117.778 (1928): 610–624.

[18] Walter Gordon. “Die energieniveaus des wasserstoffatoms nach der diracschen quantentheorie des elektrons.” Zeitschrift für Physik A Hadrons and Nuclei 48.1 (1928): 11–14.

[19] Charles Galton Darwin. “The wave equations of the electron.” Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character 118.780 (1928): 654–680.

[20] Hermann, J (1710). “Unknown title”. Giornale de Letterati D’Italia. 2: 447–467; Hermann, J (1710). “Extrait d’une lettre de M. Herman à M. Bernoulli datée de Padoüe le 12. Juillet 1710”. Histoire de l’academie royale des sciences (Paris). 1732: 519–521; Bernoulli, J (1710). “Extrait de la Réponse de M. Bernoulli à M. Herman datée de Basle le 7. Octobre 1710”. Histoire de l’academie royale des sciences (Paris). 1732: 521–544; Laplace, PS (1799). Traité de mécanique celeste. Tome I, Premiere Partie, Livre II, pp.165ff; Gibbs, JW; Wilson EB (1901). “Vector Analysis.” New York: Scribners. p. 135; Runge, C (1919). “Vektoranalysis. I.” Leipzig: Hirzel; Lenz, W (1924). “Über den Bewegungsverlauf und Quantenzustände der gestörten Keplerbewegung”. Zeitschrift für Physik. 24: 197 - 207.

[21] W. Pauli. “Über das Wasserstoffspektrum vom Standpunkt der neuen Quantenmechanik”. Zeitschrift für Physik. 36. (1926): 336 - 363.

[22] V. Fock. “Zur Theorie des Wasserstoffatoms”. Zeitschrift für Physik. 98. (1935): 145 - 154.

[23] V. Bargmann. ”Zur Theorie des Wasserstoffatoms: Bemerkungen zur gleichnamigen Arbeit von V. Fock”. Zeitschrift für Physik. 99. (1936): 576 - 582.

[24] E. Schrödinger. “A method of determining quantum–mechanical eigenvalues and eigenfunctions”, Proc. Roy. Irish Acad. A46, 9 (1940).

[25] P. A. M. Dirac. “Principles of Quantum Mechanics”, (Clarendon Press, Oxford, 1935) 2nd ed.

[26] H. Weyl. “The Theory of Groups and Quantum Mechanics”, (Interscience Publishers, Inc., New York, 1949).

[27] L. Infeld, T. E. Hull. “The Factorization Method”, Review of Modern Physics, 23, 21 (1951).

[28] Robert Gilmore. “Lie Groups, Physics, and Geometry: An Introduction for Physicists, Engineers and Chemists.” Cambridge: Cambridge University Press (2008).

[29] M. H. Johnson and B. A. Lippmann, Phys. Rev. 78, 329 (1950).

[30] Edward Witten. “Dynamical breaking of supersymmetry.” Nuclear Physics B 188.3 (1981): 513–554.

[31] Fred Cooper, Avinash Khare, and Uday Sukhatme. “Supersymmetry and quantum mechanics.” Physics Reports 251.5–6 (1995): 267–385.

[32] V. Alan Kostelecký and Michael Martin Nieto. “Evidence for a phenomenological supersymmetry in atomic physics.” Physical Review Letters 53.24 (1984): 2285.

[33] R. D. Tangerman , and J. A. Tjon. “Exact supersymmetry in the nonrelativistic hydrogen atom.” Physical Review A 48.2 (1993): 1089.

[34] Jens Peder Dahl, and Thomas Jøorgensen. “On the Dirac–Kepler problem: The Johnson–

Lippmann operator, supersymmetry, and normal–mode representations.” International Journal of Quantum Chemistry 53.2 (1995): 161–181.

[35] Hosho Katsura and Hideo Aoki. “Exact supersymmetry in the relativistic hydrogen atom in general dimensions–supercharge and the generalized Johnson–Lippmann operator.” Journal of mathematical physics 47.3 (2006): 032301.

[36] Tamari T. Khachidze and Anzor A. Khelashvili. “The hidden symmetry of the Coulomb problem in relativistic quantum mechanics: From Pauli to Dirac.” American journal of physics 74.7 (2006): 628–632.

[37] Lawrence C. Biedenharn. “The ‘Sommerfeld Puzzle’ revisited and resolved.” Foundations of Physics 13.1 (1983): 13–34.

[38] Anzor Khelashvili and Tamar Khachidze. “Rigorous Theoretical Arguments for Suppression of the Lamb Shift.” Bull. Georg. Natl. Acad. Sci 7.2 (2013).

[39] Savely G. Karshenboim. “Precision physics of simple atoms: QED tests, nuclear structure and fundamental constants.” Physics reports 422.1–2 (2005): 1–63.

[40] Jethro van Ekeren. “A Treatise on the Hydrogen Atom.” University of Waikato PhD thesis (2008).

[41] Michael I. Eides, Howard Grotch, and Valery A. Shelyuto. ”Theory of light hydrogenlike atoms.” Physics Reports 342.2–3 (2001): 63–261.

A 付録

Dirac 方程式の変形について

ここでは、

$$V(r) = -\frac{\kappa}{r} \tag{166}$$

とする。Dirac 方程式

$$\left[c\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p}\rho_1 + m_e c^2\rho_3 + (V-E)\right]\psi = 0 \tag{167}$$

の両辺に ρ_3 を掛けると、

$$\left[\hbar c\boldsymbol{\sigma}\cdot\nabla\rho_2 + m_e c^2 + (V-E)\rho_3\right]\psi = 0 \tag{168}$$

が成立する。この左辺の線形演算子を O_+ とかく。ここで、

$$O_- = \hbar c\boldsymbol{\sigma}\cdot\nabla\rho_2 - m_e c^2 + (V-E)\rho_3 \tag{169}$$

とすると、

$$[O_+, O_-] = 0 \tag{170}$$

が成立する。

ここで、

$$O_- O_+ \Psi = 0 \tag{171}$$

の解 Ψ について

$$O_+ O_- \Psi = 0 \tag{172}$$

が成立する。すなわち、$\psi = O_- \Psi$ は Dirac 方程式

$$O_+ \psi = 0 \tag{173}$$

を満たす。

一方、

$$O_+ \psi = 0 \tag{174}$$

の解 ψ は

$$O_- O_+ \psi = 0 \tag{175}$$

を満たす。

したがって、

$$O_- O_+ \Psi = 0 \tag{176}$$

を解くと Dirac 方程式のスペクトルを必要十分得ることができる。ここで、

$$\begin{aligned} O_- O_+ &= \left[(\hbar c)^2 \nabla^2 - (m_e c^2)^2 + (V - E)^2 + \hbar c \mathrm{i} \rho_1 \boldsymbol{\sigma} \cdot (\nabla V)\right] & (177) \\ &= \left[(\hbar c)^2 \nabla^2 - (m_e c^2)^2 + \left(\frac{\kappa}{r} + E\right)^2 + \frac{\mathrm{i}\hbar c \kappa}{r^3} \rho_1 \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{r}\right] & (178) \end{aligned}$$

であるから、

$$\left[(\hbar c)^2 \nabla^2 - (m_e c^2)^2 + \left(\frac{\kappa}{r} + E\right)^2 + \frac{\mathrm{i}\hbar c \kappa}{r^3} \rho_1 \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{r}\right] \psi = 0 \tag{179}$$

を解くことに帰着する。これを展開すると式 13 が出る。

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} - \frac{\boldsymbol{L}^2 - \alpha^2 - \mathrm{i}\alpha \rho_1 \boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\boldsymbol{r}}}{r^2} + \frac{2E'\alpha}{r} + E'^2 - m_e'^2\right] \Psi = 0.$$

Laguerre 関数について

次の方程式

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} - \frac{\tilde{l}(\tilde{l}+1)}{r^2} + \frac{A}{r} - B\right] \varphi_l(r) = 0 \tag{180}$$

を考える。ただし、$A, B > 0,\ \tilde{l} \in \mathbb{R}$ とする。

この時、

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} - \frac{\tilde{l}(\tilde{l}+1)}{r^2} + \frac{A}{r} - B\right]\varphi_l(r) = 0 \tag{181}$$

となる。

Laguerre 関数

$$L_n^\alpha(x) = \frac{(\alpha+1)_n}{n!}M(-n;\alpha+1;x) \tag{182}$$

を用いて[*9]関数

$$\Phi_n^\alpha(x) = e^{-x/2}x^{(\alpha+1)/2}L_n^\alpha(x) \tag{183}$$

を定義すると、

$$\left[\frac{d^2}{dx^2} - \frac{1}{4} + \frac{2n+\alpha+1}{2x} - \frac{\alpha^2-1}{4x^2}\right]\Phi_n^\alpha(x) = 0 \tag{184}$$

が成立している。実は、ラゲール関数を n が実数になるように拡張可能であり、これによって定義される Φ_n^α についても式 184 は成立する。[*10]

式 181 と式 184 を見比べて、

$$r = r'/\sqrt{4B} \tag{185}$$

を導入すると、式 181 は

$$\left[\frac{d^2}{dr'^2} - \frac{1}{4} + \frac{A/\sqrt{B}}{2r'} - \frac{(2\tilde{l}+1)^2-1}{4r'^2}\right]\varphi_l(\sqrt{4B}\boldsymbol{r}') = 0 \tag{186}$$

のように変形でき、式 184 と似た形になっていることがわかる。すなわち、186 の解は

$$\begin{align} \varphi_l(\sqrt{4B}r') &= \Phi^{2\tilde{l}+1}_{A/\sqrt{4B}-\tilde{l}-1}(r') \tag{187} \\ &= e^{-r'/2}r'^{\tilde{l}+1}L^{2\tilde{l}+1}_{A/\sqrt{4B}-\tilde{l}-1}(r') \tag{188} \end{align}$$

となることが分かる。

束縛状態において波動関数が $r \to \infty$ で減衰するという境界条件より、$A/\sqrt{4B} - \tilde{l} - 1$ は非負整数となる必要がある。[*11]すなわち、

$$A/\sqrt{4B} - \tilde{l} - 1 = n - 1 \quad (n \in \mathbb{Z}_+) \tag{189}$$

とおける。

---

*9 $M(\alpha;\beta;x) = \sum_{k=0}^{\infty}\frac{(\alpha)_k}{(\beta)_k}\frac{x^k}{k!}$ は Kummer の第一種合流型超幾何関数。例えば Wikipedia を参照

*10 非負整数 n を実数 ν に拡張する場合は $L_\nu^\alpha(x) = \frac{\Gamma(\alpha+\nu+1)}{\Gamma(\nu+1)\Gamma(\alpha+1)}M(-n;\alpha+1;x)$

*11 実は非整数の正実数 n に拡張したラゲール多項式は $x \to \infty$ で $L_n(x) \to x^n e^x$ のように発散する。また、負実数 n の多項式については、$L_n(x) \to e^x x^{-n-1}$ のように発散する。陪多項式についても同様。これの証明は別の機会に書く。

「スピン 1/2」の Klein–Gordon 方程式

Klein–Gordon 方程式で微細構造を導出することは失敗したが、微細構造を表現する項を人工的に付与することで、表現可能であることが知られている。それは、Klein–Gordon 方程式を二元スピノールに対する方程式だと思って、そこにスピン軌道相互作用を表す項を後から与える方法である。[*12]すなわち、

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}-\frac{\boldsymbol{L}^2-\alpha^2-\mathrm{i}\alpha\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{r}}}{r^2}+\frac{2E'\alpha}{r}+E'^2-m_e'^2\right]\Psi=0 \tag{190}$$

という方程式を解く。四元スピノールに対する方程式である Dirac 水素原子との違いは ρ_1 が存在しないことである。この時 Dirac 方程式と同様のやり方で方程式を解くことができ、Dirac 方程式と同じ束縛状態のスペクトルを与える。

[*12] Robert J. Ducharme. "Exact Solution of the Klein–Gordon Equation for the Hydrogen Atom Including Electron Spin." arXiv preprint arXiv:1006.3971 (2010). を参考に思いついたものである。