水素様原子における因数分解解法と超対称性量子力学（SUSY QM）

adhara*

2021 年 5 月 2 日

目次

* Twitter @adhara_mathphys

1　はじめに

因数分解 (factorization) を用いた方法は歴史的には E. Schrödinger が創出した方法[*1]であるが、P. A. M. Dirac[*2]や H. Weyl[*3]による示唆もあった。L. Infeld, T. E. Hull (1951)[*4]によって体系的にまとめられた方法である。

実は因数分解解法は超対称性量子力学と関係がある。超対称性量子力学については、F. Cooper, A. Khare and U. Sukhatme (1995)[*5] に詳しい。

本ノートでは水素原子における因数分解解法の適用例に対して超対称性量子力学の観点を持ち込むことで、水素原子に潜む超対称性量子力学的側面を論じる。

本ノートは以下の構成になっている。第二節では水素原子に関する問題設定を行う。第三節では水素原子の因数分解解

---

*1 A method of determining quantum-mechanical eigenvalues and eigenfunctions", Proc. Roy. Irish Acad. A46, 9 (1940).

*2 P. A. M. Dirac: "Principles of Quantum Mechanics", (Clarendon Press, Oxford, 1935) 2nd ed.

*3 H. Weyl: "The Theory of Groups and Quantum Mechanics", (Interscience Publishers, Inc., New York, 1949).

*4 L. Infeld, T. E. Hull: "The Factorization Method", Review of Modern Physics, 23, 21 (1951).

*5 Cooper, F., Khare, A., & Sukhatme, U. (1995). Supersymmetry and quantum mechanics. Physics Reports, 251(5-6), 267-385.

法について説明する。第四節では超対称性量子力学（SUSY QM）を導入している。第五節で因数分解解法と超対称性量子力学の観点を論じている。

2　問題設定

非相対論的水素様原子に対する Schrödinger 方程式

$$
\begin{aligned}
H\Psi(\boldsymbol{r}) &= \left[-\frac{\hbar^2}{2m_e}\nabla^2 - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}\right]\Psi(\boldsymbol{r}) \\
&= \left[-\frac{\hbar^2}{2m_e}\nabla^2 - \frac{\kappa}{r}\right]\Psi(\boldsymbol{r}) \\
&= E\Psi(\boldsymbol{r})
\end{aligned} \tag{1}
$$

を解くことを考える。ここで、Z は原子の価数である。また、m_e は正確には電子そのものの質量というよりは換算質量であるべきである。

中心力ポテンシャルの問題なので、球座標表示 (r, θ, ϕ) で解くことができる。中心力下ポテンシャルでは、よく知られているように角運動量演算子 $\boldsymbol{L} = \boldsymbol{r} \times (-i\hbar\nabla_{\boldsymbol{r}})$ に対して、$\boldsymbol{L}^2$ が保存する。球座標表示にして、角運動量演算子を用いると

Schrödinger 方程式は

$$\left[\frac{d^2}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{d}{dr}-\frac{\boldsymbol{L}^2}{\hbar^2 r^2}+\frac{2}{r}\frac{\kappa m_e}{\hbar^2}+2E\frac{m_e}{\hbar^2}\right]\Psi(\boldsymbol{r})=0 \tag{2}$$

のように書き換えられる。よく知られているように角度部分と動径部分は変数分離することが出来る、すなわち球面調和関数を用いて、

$$\Psi(\boldsymbol{r})=Y_{lm}(\theta,\phi)R_l(r) \tag{3}$$

と書くことが出来る。整数 l,m はそれぞれ角運動量量子数、磁気量子数と呼ばれ、$l\geq 0,-l\leq m\leq l$ である。

ここで、$Y_{lm}(\theta,\phi)$ は L^2,L_z の同時固有状態であり、

$$\boldsymbol{L}^2 Y_{lm}(\theta,\phi)=l(l+1)\hbar^2 Y_{lm}(\theta,\phi) \tag{4}$$
$$\boldsymbol{L}_z Y_{lm}(\theta,\phi)=m\hbar Y_{lm}(\theta,\phi) \tag{5}$$

である。さらに規格化条件

$$\int_0^{2\pi}d\phi\int_0^{\pi}\sin\theta d\theta\left|Y_{lm}(\theta,\phi)\right|^2=1 \tag{6}$$

が成立している。

したがって、動径部分の固有値方程式は

$$\left[\frac{d^2}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{d}{dr}-\frac{l(l+1)}{r^2}+\frac{2}{r}\frac{\kappa m_e}{\hbar^2}+2E\frac{m_e}{\hbar^2}\right]R_l(r)=0 \tag{7}$$

に帰着する。

さらに、$R_l(r) = \psi_l(r)/r$ とおけば、一回微分の項を消去することができる。すなわち、ψ_l に関する固有値方程式

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} + \frac{2}{r}\frac{\kappa m_e}{\hbar^2} + 2E_l\frac{m_e}{\hbar^2}\right]\psi_l(\boldsymbol{r}) = 0 \tag{8}$$

に帰着させることができる。

$$H_l(r) = -\frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{2}{r}\frac{\kappa m_e}{\hbar^2} \tag{9}$$

とおけば、

$$H_l(r)R_l(r) = 2E_l\frac{m_e}{\hbar^2}\psi_l(r) =: \epsilon_l\psi_l(r) \tag{10}$$

と書ける。以下、この固有値方程式における束縛状態の解を求めることを考える。

3　水素原子の因数分解解法

3.1　昇降演算子の導入

この節では、

$$H_l(r) = a_l^\dagger a_l + c_l \tag{11}$$

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、

$$a_l = \frac{d}{dr} + \frac{l}{r} - \frac{1}{l}\frac{\kappa m_e}{\hbar^2} \tag{12}$$

$$a_l^\dagger = -\frac{d}{dr} + \frac{l}{r} - \frac{1}{l}\frac{\kappa m_e}{\hbar^2} \tag{13}$$

$$c_l = -\frac{1}{l^2}\left(\frac{\kappa m_e}{\hbar^2}\right)^2 \tag{14}$$

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、

$$[a_l, a_l^\dagger] = -\frac{2l}{r^2} \tag{15}$$

となることから、

$$\begin{aligned} a_l a_l^\dagger &= a_l^\dagger a_l - \frac{2l}{r^2} \\ &= H_l(r) - c_l - \frac{2l}{r^2} \\ &= H_{l-1}(r) - c_l \end{aligned} \tag{16}$$

となり、（ただし、$l \geq 1$）

$$H_{l-1}(r) = a_l a_l^\dagger + c_l \tag{17}$$

が成立する。したがって、$l \geq 1$ で、

$$H_l(r) = a_{l+1}a_{l+1}^\dagger + c_{l+1} = a_l^\dagger a_l + c_l \tag{18}$$

となる。ただし、式 18 の最初の等式に付いては $l = 0$ でも成立している。

3.2　昇降演算子の働き

角運動量量子数 $l \geq 0$ に対応する解が

$$H_l\psi_{l,k} = \epsilon_{l,k}\psi_{l,k} \tag{19}$$

のように与えられたとする。

このとき、

$$\begin{aligned} H_{l+1}a_{l+1}^\dagger\psi_{l,k} &= \left[a_{l+1}^\dagger a_{l+1} + c_{l+1}\right]a_{l+1}^\dagger\psi_{l,k} \\ &= \left[a_{l+1}^\dagger(\mathcal{H}_l - c_{l+1}) + c_{l+1}a_{l+1}^\dagger\right]\psi_{l,k} \\ &= \epsilon_{l,k}a_{l+1}^\dagger\psi_{l,k} \end{aligned} \tag{20}$$

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、

$$H_{l-1} a_l \psi_{l,k} = \left[a_l a_l^\dagger + c_l \right] a_l \psi_{l,n}$$
$$= \left[a_l (H_l - c_l) + c_l a_l \right] \psi_{l,k}$$
$$= \epsilon_{l,k} a_l \psi_{l,k} \tag{21}$$

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。

3.3　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。（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、

$$H_l\psi = \left[a_{l+1}a_{l+1}^\dagger + c_{l+1}\right]\psi = c_{l+1}\psi \tag{22}$$

となり、対応する固有値は

$$c_{l+1} = -\frac{1}{(l+1)^2}\left(\frac{\kappa m_e}{\hbar^2}\right)^2 \tag{23}$$

となる。この ψ を $\psi_{l,0}$ とすると、

$$\psi_{l,0} \propto r^{l+1}e^{-\frac{r}{l+1}\frac{\kappa m_e}{\hbar^2}} \tag{24}$$

がその関数形である。対応するエネルギーは、

$$E_{l,0} = -\frac{1}{2(l+1)^2}\frac{\kappa^2 m_e}{\hbar^2} \tag{25}$$

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。

■縮重度

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

$$\sum_{m=0}^{l}(2m+1) = l(l+1)+l+1 = (l+1)^2 \tag{26}$$

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　超対称性量子力学（SUSY QM）

4.1　超対称性ハミルトニアン

次の様なハミルトニアンを考える。

$$H = \begin{pmatrix} H_1 & 0 \\ 0 & H_2 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} E & 0 \\ 0 & E \end{pmatrix} \tag{27}$$

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、

$$H_1 = A^\dagger A, \tag{28}$$

$$H_2 = AA^\dagger \tag{29}$$

と書けるものとする。考えているヒルベルト空間は

$$\mathcal{H}_{fb} = L^2(\mathbb{R}) \oplus L^2(\mathbb{R}) \tag{30}$$

というものになる。

ここで、二つの共役な演算子

$$Q = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ A & 0 \end{pmatrix}, \tag{31}$$

$$Q^\dagger = \begin{pmatrix} 0 & A^\dagger \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \tag{32}$$

を定義すると反交換ブラケット $\{\cdot,\cdot\}$[*6]を用いて、

$$\{Q, Q\} = 0 \tag{33}$$

$$\left\{Q^\dagger, Q^\dagger\right\} = 0 \tag{34}$$

$$\left\{Q, Q^\dagger\right\} = H - E \tag{35}$$

などが成立する。そして、

$$Q^2 = \left(Q^\dagger\right)^2 = 0 \tag{36}$$

である。

したがって、

$$H = \left(Q + Q^\dagger\right)^2 + E \tag{37}$$

と書くことが可能である。この様なハミルトニアンを**超対称性ハミルトニアン**と呼ぶ。

---

*6 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。

4.2　フェルミオン演算子の導入

行列で定義される次の演算子

$$f = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \tag{38}$$

$$f^\dagger = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \tag{39}$$

を導入する。これらの間には

$$\{f, f^\dagger\} = 1 \tag{40}$$

$$\{f, f\} = 0 \tag{41}$$

$$\{f^\dagger, f^\dagger\} = 0 \tag{42}$$

という関係式が成立し、

$$f^2 = \left(f^\dagger\right)^2 = 0 \tag{43}$$

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、

$$Q = Af \tag{44}$$

$$Q^\dagger = A^\dagger f^\dagger \tag{45}$$

が成立し、先に導入した式 27 の超対称性ハミルトニアンは

$$H = \left(Af + A^\dagger f^\dagger\right)^2 + E \tag{46}$$

と書けることがわかる。

4.3　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、

$$\mathcal{H}_f = \{c_0|0\rangle + c_1|1\rangle \mid |c_0|^2 + |c_1|^2 = 1, c_0, c_1 \in \mathbb{R}\} \tag{47}$$

である。ここで、

$$|0\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \tag{48}$$

$$|1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \tag{49}$$

と見なすことができる。すなわち、

$$f^\dagger|1\rangle = 0 \tag{50}$$

$$f^\dagger|0\rangle = |1\rangle \tag{51}$$

$$f^\dagger|0\rangle = 0 \tag{52}$$

$$f^\dagger|1\rangle = |0\rangle \tag{53}$$

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

$$\langle 0|f^\dagger f|0\rangle = 0 \tag{54}$$
$$\langle 1|f^\dagger f|1\rangle = 1 \tag{55}$$

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

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_{fb} &= L^2(\boldsymbol{R}) \otimes_{\mathbb{R}} \mathcal{H}_f \\ &= \{f|0\rangle + b|1\rangle \mid \|f\|^2 + \|b\|^2 = 1, f, b \in L^2(\mathbb{R})\}\end{aligned} \tag{56}$$

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。

4.4　超対称性ハミルトニアンの超対称性

超対称性ハミルトニアンは

$$\begin{aligned}H &= \left(Af + A^\dagger f^\dagger\right)^2 + E \\ &= AA^\dagger f f^\dagger + A^\dagger A f^\dagger f + E \\ &= AA^\dagger\left(1 - f^\dagger f\right) + A^\dagger A f^\dagger f + E\end{aligned} \tag{57}$$

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、

$$|b\rangle = b(x)|0\rangle \tag{58}$$

と表されてエネルギーが ϵ_b とする。ここで

$$|f\rangle = A^\dagger f^\dagger |b\rangle = A^\dagger b(x)|1\rangle \tag{59}$$

とすると、

$$\begin{aligned}
H|f\rangle &= (A^\dagger A f^\dagger f + E)A^\dagger f^\dagger b(x)|0\rangle \\
&= A^\dagger f^\dagger (AA^\dagger f f^\dagger + E) b(x)|0\rangle \\
&= A^\dagger f^\dagger (A^\dagger A f^\dagger f + AA^\dagger f f^\dagger + E) b(x)|0\rangle \\
&= A^\dagger f^\dagger H|b\rangle \\
&= \epsilon_b |f\rangle
\end{aligned} \tag{60}$$

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、

$$\langle\psi \mid H \mid \psi\rangle = \|A^\dagger f^\dagger|\psi\rangle\|^2 + \|Af|\psi\rangle\|^2 + E \geq E \tag{61}$$

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

$$\begin{aligned}\langle f|f\rangle &= \langle b|AA^\dagger ff^\dagger|b\rangle \\ &= \langle b|H-E|b\rangle \\ &= \epsilon_b - E\end{aligned} \tag{62}$$

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

$$\epsilon_b > E \tag{63}$$

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、

$$A f_0 = 0 \tag{64}$$

後者が解であれば、

$$A^\dagger b_0 = 0 \tag{65}$$

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

$$\Delta = n_b - n_f \tag{66}$$

定義したとき、これは **Witten 指数**と呼ばれる量となる。

5　因数分解解法と超対称性量子力学

　以前の記法をそのまま用いる。式 9 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、

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_l(r) &= \begin{pmatrix} H_l(r) & 0 \\ 0 & H_{l-1}(r) \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} a_l^\dagger a_l & 0 \\ 0 & a_l a_l^\dagger \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} c_l & 0 \\ 0 & c_l \end{pmatrix}\end{aligned} \tag{67}$$

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。

したがって、前節の議論によれば、このハミルトニアンは最低エネルギー（候補）が c_l となる状態を除いて縮退することが保証される。

一方で、最低エネルギー c_l を取る状態は実際に存在する。すなわち、$a_l^\dagger \psi = 0$ を満たす $\psi(r)$ は H_{l-1} の固有状態であり、固有値が c_l となるものである。すなわち超対称性量子力学的な見方としてはボソン的な最低エネルギー状態が一つ存在することを意味する。一方で、H_l の固有状態で c_l となるものは存在しない。これは超対称性量子力学的な見方としてはフェルミオン的な最低エネルギー状態が存在しないことを意味する。したがって、この場合の Witten 指数は

$$\Delta = 1 \tag{68}$$

となる。