水素原子に潜む数理構造
分子科学への応用を見据えて

２０１９年分子科学若手の会夏の学校第二分科会

伊藤祐斗

2019 年 8 月 19 日～8 月 23 日

目次

第 1 章

水素原子の数理概要

1.1　水素原子と量子論・量子力学の構築

水素原子と量子論の関わりは 1885 年に Balmer 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 [1]。1890 年には Balmer の発見を受けて Rydberg の公式が提唱され、新たな発光スペクトルの存在が予想された [2]。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発見により確かめられた [3]。

Rydberg の公式の意味は、20 世紀の初頭に現れた Bohr の原子模型 [4] や Bohr–Sommerfeld の量子化 [5] 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、

$$E_n = -\frac{1}{2n^2}\frac{m_e}{\hbar^2}\left(\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0}\right)^2 \tag{1.1}$$

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。[*1]

一方で、Rydberg の公式と前期量子論の出現により法則は見えてきたのだが、裏にある力学はまだわかっていなかった。

前期量子論を発展させ、エネルギーを求める問題を固有値問題として定式化した代表的人物が Schrödinger や Heisenberg である。彼らの基礎方程式に従って量子論的粒子の振る舞いを記述する枠組みが量子力学であり、Schrödinger については波動力学形式の量子

[*1] より精度の良い測定を行うと細かい準位の分裂が起きていることが知られている。相対論的効果（微細構造、スピン軌道相互作用等の Dirac 方程式から説明されるもの）、原子核の構造に由来する効果（原子核の双極子モーメントとの相互作用（超微細構造）、核四極子相互作用、原子核が有限サイズである効果)、量子電磁気学的効果（Lamb shift 等）等が原因となっている。

力学 [6]、Heisenberg については行列力学形式の量子力学 [7]、と呼ばれることがある。[*2] 量子力学の創設により水素原子を始めとする色々なポテンシャル下におけるエネルギーを求めることが可能になった。

水素原子に対して量子力学が適用されたのは量子力学の創設とほぼ同時である。1926 年に Schrödinger は波動力学形式の量子力学創設に関わる 4 部作 [6] を表したが、その中で Schrödinger 方程式の解としての水素原子の波動関数が求められている。

1.2 水素原子における偶然縮退と力学的対称性

1.2.1 水素原子における偶然縮退

Schrödinger 方程式を用いた水素原子の解法は量子力学の誕生とともに世界中に知られるようになった。一方で、水素原子の Schrödinger 方程式には興味深い数理構造が潜んでいることが「偶然縮退」と呼ばれる問題を通じて次第に明らかになっていた。Schrödinger 方程式は対称性に伴ってエネルギーの縮退が起きる場合がある。縮退は対称性を表す群の表現論によって理解可能である。

例えば、球対称性 $SO(3)$ を持つポテンシャル下では Schrödinger 方程式

$$H\Psi(\mathbf{r}) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m_e}\nabla^2 - V(r)\right]\Psi(\mathbf{r}) = E\Psi(\mathbf{r}) \tag{1.2}$$

を球極座標[*3]によって変数分離を行うことができ、固有波動関数 $\Psi_{n,l,m}(\theta,\phi,r)$ を球面調和関数 $Y_{l,m}(\theta,\phi)$ と動径方向関数 $R_{n,l}(r)$ の積

$$\Psi_{n,l,m}(\theta,\phi,r) = Y_{l,m}(\theta,\phi)R_{n,l}(r) \tag{1.3}$$

の形で表示できる。

球面調和関数は角運動量量子数 l、磁気量子数 m、で分類することが可能である。ここで、l は角運動量の二乗演算子 L^2 の固有値で定まり、m は角運動量の量子化軸方向成分（量子化軸は任意に定めることが可能だが、z 方向に定めた場合は L_z のこと）の固有値で定まる。すなわち、

$$\begin{aligned} L^2Y_{l,m} &= \hbar^2 l(l+1)Y_{l,m} \\ l_zY_{l,m} &= \hbar mY_{l,m} \end{aligned} \tag{1.4}$$

---

*2 両形式は Schrödinger 自身により等価であることが示されており [8]、現在では特に区別はされない。

*3 動径を r、量子化軸から見た極角を θ、方位角を ϕ とする。

のように解かれる。両量子数の取り得る値は

$$l \in \mathbb{Z}_{\geq 0}, m \in \mathbb{Z}, -l \leq m \leq l \tag{1.5}$$

のように制限を受ける。したがって、l を決めた時に取り得る m の数は $2l+1$ 個である。

動径方向の固有関数 $R_{n,l}$ に出てくる量子数 n は動径方向の節の数（したがって $n \in \mathbb{Z}_{\geq 0}$）である。固有値 $E_{n,l}$ は動径方向の固有関数 $R_{n,l}$ ごとに得られる。固有値が $E_{n,l}$ となる状態の数 (縮重度) は $2l+1$ である。

水素原子においても球対称性 $SO(3)$ に基づく縮退が存在する。しかしながら水素原子においては

$$V(r) = -\frac{\kappa}{r} \tag{1.6}$$

として、

$$E_{n,l} = -\frac{1}{2(n+l+1)^2}\frac{m_e\kappa^2}{\hbar^2} \tag{1.7}$$

となり、固有値が $n+l$ だけで定まってしまうという現象が生じている。したがって、固有値が $E = -\frac{1}{2N^2}\frac{m_e\kappa^2}{\hbar^2}$ となる状態の縮重度は N^2 となっており、一般の $SO(3)$ の系よりも縮重度が大きい。系が元々持っていた空間対称性からは予測できない高度な縮退は「偶然縮退」と呼ばれ、より大きな対称性の存在が示唆されるのである。

1.2.2 Laplace–Runge–Lenz ベクトルと力学的対称性の発見

実のところ、「偶然縮退」を特徴付ける対称性を明らかにするための数理物理的道具立ては、量子力学の創設以前より存在していた。すなわち、水素原子の問題の古典力学バージョンである Kepler 問題における保存量 (運動の第一積分) を求める問題に遡ることができる。

球対称ポテンシャル下では角運動量保存則に伴って軌道が平面内に束縛されることが知られているが、Kepler 問題では引力ポテンシャルが Coulomb 型となることにより、特別な状況が生じることがわかっている。すなわち Kepler 問題ではエネルギーが負となる束縛状態においては軌道が保存される。このような軌道が保存される系においては独立な運動の第一積分は 5 個となっている。Kepler 問題はエネルギーと角運動量三成分の他に独立な運動の第一積分（保存量）が一つあるということである。Kepler 問題におけるこの独立した第一積分を含んでいるものが Laplace–Runge–Lenz(LRL) ベクトルである。LRL ベクトルは角運動量ベクトルと直交し、近日点とポテンシャル中心を結ぶ方

向を指している。このような独立な運動の第一積分が $2n-1$（自由度 n の場合）となるハミルトン系は後に極大超可積分系 [11] という概念でまとめられることになる。例えば 3 次元等方調和振動子は極大超可積分系であり、エネルギーや角運動量ベクトルの他に Jauch–Hill–Fradkin テンソルというものが保存される [12, 13]。実は、球対称性を持つポテンシャルで束縛状態において軌道が必ず保存されるようなものは Coulomb 型か等方調和振動子型に限られる、ということは Bertrand の定理 [9, 10] として 19 世紀より知られている。Bertrand の定理の主張は両系が極大超可積分系であることを意味している、というのが現代的な解釈である。

LRL ベクトルの発見史を簡単に記述する。LRL ベクトルの最初の発見者は Hermann[14] であり、次にその師匠である Johann Bernoulli[15] によって良い形にまとめられたとされている。本ベクトルの筆頭に名前を残している Laplace[16] は解析力学的な定式化を行ったとのことで、現在では最初の発見者ではないとされている。その後、Gibbs[18] や Runge[19] によって再発見されたが、彼らはベクトル解析の記号を用いて表現しており、これにより LRL ベクトルは広く知られるようになった。*4Lenz[17] については量子論的取り扱いを行った（自己随伴作用素になるように再定義した）という貢献である。また、水素原子のスペクトルを導出するために Pauli[20] が有効活用したことから、量子力学版 LRL ベクトルを Lenz–Pauli ベクトルと呼ぶことがある。

LRL ベクトルのようなハミルトニアンの空間的対称性から予測できない保存量に関連した対称性は力学的対称性と呼ばれる。LRL ベクトルの存在、すなわち力学的対称性の存在が「偶然縮退」を説明することになる。

まず、Pauli が角運動量ベクトルと LRL ベクトル各成分、計 6 個の演算子が成す Lie 代数を用いて Heisenberg 形式で定式化された水素原子の量子力学の問題を解いた [20]。適当な線形結合をすることにより上記 Lie 代数が独立な $\mathfrak{su}(2)$ 代数の和で表される (直和) ことを利用している。束縛状態全体からなる Hilbert 空間を考えた時に、上記 Lie 代数のユニタリ既約部分空間が、縮退した束縛状態からなる部分空間であることがわかったのである。本テキスト 3 章においてこの Pauli の解法を解説する。

水素原子の Schrödinger を幾何学的に考察し、四次元空間の回転対称性 $SO(4)$ の存在を明らかにしたのが、Fock[21] である。Fock は適当な変数変換により水素原子の波動関数を四次元空間中の超球面調和関数として表示できることが明らかにした。*5適当な変換とは、空間フーリエ変換による運動量表示の導入と立体射影 (一点コンパクト化) による

*4 有名な Gibbs の講義録を基にした教科書やそれに続く Runge の教科書に載っている。

*5 現代的な視点としては、等質空間 S^3 上の調和解析とみなすことができる。

運動量空間中の変数変換である。

Pauli と Fock の解法の関係を明らかにしたのが、Bargmann[22] である。Bargmann は、Pauli の発見した Lie 代数が実は Lie 代数 $\mathfrak{so}(4)$ であり、四次元回転対称性を生成するを明らかにした。すなわち、LRL ベクトルの幾何学的役割が明らかにされた。*6

ここまでは束縛状態について述べたが、水素原子にはエネルギーゼロ状態・散乱状態が存在する。これら三状態は相異なる力学的対称性を持つことが知られている。束縛状態が四次元回転対称性 $SO(4)$ を持つのに対して、エネルギーゼロ状態はユークリッド群 $ISO(3)$ の対称性、散乱状態はローレンツ群 $SO(3,1)$ の対称性を持つ。束縛状態以外の対称性についても LRL ベクトルが重要な働きをする。4 章では三状態における力学的対称性を解説する。

1.3 スペクトル生成代数と共形幾何学構造

水素原子にはスペクトル生成代数 $\mathfrak{su}(1,1)$ という、前節で述べた力学的対称性 $\mathfrak{so}(4)$ 代数とは別の代数構造が備わっている。スペクトル生成代数は異なるエネルギーを持つ状態間を結びつける演算子が出てくる代数である。一方で、力学的対称性代数は同じエネルギーの状態間を結びつける演算子からなる代数である。この違いはハミルトニアンとの可換性として表れる、すなわち対称性代数の方はハミルトニアンと可換となるが、スペクトル生成代数の方は非可換となる。また、$\mathfrak{so}(4)$ が有限次元ユニタリ既約表現を持つのに対して、スペクトル生成代数 $\mathfrak{su}(1,1)$ の方は有限次元のユニタリ既約表現を持たない。この数学的事実は、対称性代数における有限次元ユニタリ既約表現の存在が物理的には有限の縮重度として表れるのに対して、スペクトル生成代数における有限次元ユニタリ既約表現の非存在は物理的には束縛状態の個数が有限でないことに対応している。5 章においてこのスペクトル生成代数の存在とそれを用いた水素原子の解法について説明する。

スペクトル生成代数 $\mathfrak{su}(1,1)$ と三状態の力学的対称性 $\mathfrak{so}(4), \mathfrak{iso}(3), \mathfrak{so}(3,1)$ 代数を統一する代数構造、すなわちそれぞれの代数を部分代数として含む大きな代数として、$\mathfrak{so}(4,2)$ 代数構造あるいは $SO(4,2)$ 群構造というものがある。このような代数構造は対称性に伴う縮重度を説明できるだけではなく、異なるエネルギーをもつ波動関数同士を結びつける演算子を含んでいる点で有用である。数学的には全ての束縛状態が力学的群の同一の既約ユニタリ表現に属することに相当している。例えば、Stark 効果のような縮退の破れを伴

*6 さらに放物座標による変数分離についても考察し、四次元の回転対称性が見えやすくなっていることを指摘した。[22]

う外場の影響を代数的に考えることができて便利である。一般にスペクトル生成代数と力学的対称性代数を統一する代数に対応する Lie 群を力学的群（dynamical group）と呼ばれる。水素原子の場合、力学的群 $SO(4,2)$ が共形幾何学に関連の深い群となるという点で数理物理学者からは注目を受けることが多かった。実は LRL ベクトルは特殊共形変換演算子というものを含む形となっていおり、水素原子の背後に潜む共形幾何学を浮かび上がらせるものとなっている。LRL ベクトルを通じて見える共形幾何学の構造については 6 章で解説する。

1.4　因数分解解法と超対称性量子力学

調和振動子の Schrödinger 方程式は因数分解 (factorization) で解くことができることが知られている [25]。これにより、微分方程式をまともに取り扱う (特殊関数を導入するという意味) ことなく、代数的にエネルギーを求めることが可能になる。同様に水素原子についても球極座標による変数分離の後に出てくる動径方向の二階微分方程式について因数分解解法が適用できる。[26]

1951 年に Infeld–Hull[27] によって二階の常微分方程式の因数分解解法が整理された。水素原子についてもこの方法により異なる角運動量をもつ状態が縮退する理由が垣間みられる。

この解法は Witten[28] らが考えた超対称性量子力学 [29] と関連が深い。すなわち、因数分解の際に導入される演算子やハミルトニアンは $\mathcal{N}=2$ 超対称性代数を構成していると見なすことができる。7 章では因数分解解法と絡めて水素原子に潜む $\mathcal{N}=2$ 超対称性代数について解説する。実は、この超対称性代数の構造は相対論効果が入ったときにも保たれること、すなわち Dirac 方程式の下でも残ることが Katsura–Aoki[30] によって示されている。この超対称性代数構造は可解な量子力学系においてよく見られる構造であり、直交多項式の研究等で重要となる [40]。

第 2 章

Kepler 問題における隠れた対称性

2.1　はじめに

この章では古典力学の Kepler 問題のハミルトニアン

$$H(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{p}) = \left[\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m} - \frac{\kappa}{r}\right] \tag{2.1}$$

における運動の積分（保存量）について考える。まずハミルトニアン H 自体が運動の積分である。

角運動量ベクトル

$$\boldsymbol{L} = \boldsymbol{x} \times \boldsymbol{p} \tag{2.2}$$

を定義すると（記号 $\times$ は外積を表す。）、Kepler 問題だけではなく一般に中心力問題においてこれが保存される。

さらに運動の積分として、Laplace–Runge–Lenz（LRL）ベクトルというものがある。LRL ベクトルは

$$\boldsymbol{M} = \frac{1}{m}\boldsymbol{p} \times \boldsymbol{L} - \frac{\kappa \boldsymbol{x}}{r}$$

で定義される。

外積の演算により両ベクトルの各成分は $i = x, y, z$ として、

$$\begin{aligned} L_i &= \sum_{j=x,y,z} \sum_{k=x,y,z} \epsilon_{ijk} x_j p_k \\ M_i &= \frac{1}{m} \sum_{j=x,y,z} \sum_{k=x,y,z} \epsilon_{ijk} p_j L_k - \frac{\kappa x_i}{r} \end{aligned} \tag{2.3}$$

で与えられることが分かる。[*1]（$\epsilon_{xyz} = \epsilon_{yzx} = \epsilon_{zxy} = -\epsilon_{yxz} = -\epsilon_{xzy} = -\epsilon_{zyx} = 1$ である。）

2.2　ハミルトン形式の解析力学

ハミルトン形式の解析力学において、量 $A = A(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{p}, t)$ の時間発展は、

$$\frac{dA}{dt} = \{A, H\} + \frac{\partial A}{\partial t} \tag{2.4}$$

のように与えられる。ただし、Poisson 括弧

$$\{A, B\} = \sum_i \left[\frac{\partial A}{\partial x_i}\frac{\partial B}{\partial p_i} - \frac{\partial A}{\partial p_i}\frac{\partial B}{\partial x_i}\right] \tag{2.5}$$

を導入した。

物理量 A が陽に時間に依らないときは、

$$\frac{dA}{dt} = \{A, H\} \tag{2.6}$$

であり、このときに A が運動の積分、すなわち保存量となるためには、

$$\{A, H\} = 0 \tag{2.7}$$

が必要十分条件である。

2.3　LRL ベクトルの性質

■問題 1

角運動量保存則と LRL ベクトル保存則は

$$\{L_i, H\} = 0,\ \{M_i, H\} = 0 \tag{2.8}$$

で与えられる。直接計算によって示してみよう。

[*1] 両方ともベクトルと呼んでしまっているが、LRL ベクトルが 1 ベクトルであるのに対して、角運動量ベクトルが 2 ベクトルあるいは擬ベクトルである。この違いは Kepler 問題を高次元化した時に顕在化する。

■問題 2
後々、M^2 という量が重要となるが、[*2]

$$M^2 = \frac{2HL^2}{m} + \kappa^2 \tag{2.9}$$

となることを示そう。

■問題 3
実は

$$\boldsymbol{M} \cdot \boldsymbol{L} = 0 \tag{2.10}$$

となり、LRL ベクトルと角運動量ベクトルは直交する。すなわち、$\boldsymbol{L}$ は運動している面[*3]に直交することから、$\boldsymbol{M}$ は運動している面にあることがわかる。これを示そう。

■問題 4
LRL ベクトルと角運動量ベクトルの各成分間の Poisson 括弧演算は

$$\{L_i, L_j\} = \sum_k \epsilon_{ijk} L_k \tag{2.11}$$

$$\{M_i, M_j\} = -\frac{2H}{m} \sum_k \epsilon_{ijk} L_k \tag{2.12}$$

$$\{L_i, M_j\} = \sum_k \epsilon_{ijk} M_k \tag{2.13}$$

のように計算されることを示そう。

2.4 離心率と LRL ベクトルの関係

$\boldsymbol{x}$ が $\boldsymbol{M}$ と成す角を θ とすると

$$\boldsymbol{M} \cdot \boldsymbol{x} = rM\cos\theta \tag{2.14}$$

となる。一方、

$$\begin{aligned} \boldsymbol{M} \cdot \boldsymbol{x} &= \frac{1}{m}(\boldsymbol{p} \times \boldsymbol{L}) \cdot \boldsymbol{x} - \kappa r \\ &= \frac{L^2}{m} - \kappa r \end{aligned}$$

[*2] $\mathfrak{so}(4)$ の Casimir 演算子を計算するときに
[*3] $\boldsymbol{x}$ と $\boldsymbol{p}$ が張る面のこと。運動面の存在は Kepler の法則の一つでもある。

なので

$$\frac{1}{r} = \frac{\kappa m}{L^2}\left(\frac{M}{\kappa}\cos\theta + 1\right) \tag{2.15}$$

となる。

■引力の場合、すなわち $\kappa > 0$ の場合

式 2.15 は原点、すなわちポテンシャル中心を焦点とする円錐曲線の方程式となっている。ここで、

$$p := \frac{L^2}{\kappa m} \tag{2.16}$$

は通径と呼ばれる量であり、

$$\begin{aligned} e &:= \frac{M}{\kappa} \\ &= \frac{1}{\kappa}\sqrt{\frac{2HL^2}{m} + \kappa^2} \\ &= \sqrt{\frac{2HL^2}{\kappa^2 m} + 1} \end{aligned}$$

は離心率と呼ばれる量である。すなわち、LRL ベクトルの大きさは離心率に関係がある。ちなみに、

- $H > 0$ のときに $e > 1$ となり双曲線上の運動
- $H = 0$ のときに $e = 1$ となり放物線上の運動
- $H < 0$ のときに $0 \leq e < 1$ となり楕円（あるいは真円）上の運動

となっている。$\theta = 0$ となるとき、r は最小となり、軌道が近日点を通ることがわかる。したがって、LRL ベクトルの方向はポテンシャル中心から近日点を向く方向となっていることがわかる。

■斥力の場合、すなわち $\kappa < 0$ の場合

つねに $H > 0$ となり、双曲線上の運動となる。式 2.15 は、

$$\frac{1}{r} = \frac{|\kappa| m}{L^2}\left(\frac{M}{|\kappa|}\cos\theta - 1\right) \tag{2.17}$$

のように書き直される。離心率は、

$$e := \frac{M}{|\kappa|} = \sqrt{\frac{2HL^2}{\kappa^2 m} + 1} \tag{2.18}$$

で、通径は

$$p := \frac{L^2}{|\kappa| m} \tag{2.19}$$

となる。やはり、近日点は $\theta = 0$ のときで、LRL ベクトルの方向はポテンシャル中心から近日点を向く方向となっていることがわかる。

第 3 章

束縛状態に対する Pauli の解法と力学的対称性 $SO(4)$

3.1　角運動量ベクトル

角運動量ベクトルは、

$$\boldsymbol{L} = \sum_{ijk} \epsilon_{ijk} x_i p_j \boldsymbol{e}_k \tag{3.1}$$

で定義される。球対称性ポテンシャル下では角運動量保存則として、

$$[L_i, H] = 0 \tag{3.2}$$
$$\left[\boldsymbol{L}^2, H\right] = 0 \tag{3.3}$$

が成立する。球対称性ポテンシャルの問題では、この保存則に対応した縮退が必ず存在する。球対称性をもつということはハミルトニアンを不変にする対称操作が $O(3)$ 群を成すということである。空間反転対称性に関する対称操作を除いた対称操作としては $SO(3)$ 群を成す。

保存則 3.3 より、角運動量の二乗 $\boldsymbol{L}^2$ とハミルトニアンは同時対角化可能となる。したがって、H の各固有状態は $\boldsymbol{L}^2$ の固有状態でもある。$\mathfrak{so}(3)$ 代数を用いることで $2l+1$ 重縮退したハミルトニアンの固有状態が存在し、対応する固有値が $\hbar^2 l(l+1)$ となることが分かる。（l は非負整数）縮退した固有状態空間は $SO(3)$ 群の一つの既約表現に属する。

3.2　量子力学版 LRL ベクトル

3.2.1　定義

量子力学版 LRL ベクトルは

$$\boldsymbol{M} = \frac{1}{2m_e}\left(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{L} - \boldsymbol{L}\times\boldsymbol{p}\right) - \frac{\kappa}{r}\boldsymbol{x} \tag{3.4}$$

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

■問題 1

このベクトルがエルミート演算子であることを示してみよう。

■問題 2

式

$$\boldsymbol{M} = \frac{1}{2}\left\{\frac{1}{2m_e}\left(\boldsymbol{x}p^2 - 2(\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{p})\boldsymbol{p}\right) + xH\right\} + \mathrm{h.c.} \tag{3.5}$$

が成立することを確かめてみよう。

3.2.2　量子力学版 LRL ベクトルの性質

■問題 3

ハミルトニアンと LRL ベクトルは交換可能

$$[\boldsymbol{M}, H] = 0 \tag{3.6}$$

であることを確かめよう。

ハミルトニアンと LRL ベクトルの自乗演算子も交換可能

$$\left[\boldsymbol{M}^2, H\right] = 0 \tag{3.7}$$

であることを確かめよう。

■問題 4

角運動量ベクトル $\boldsymbol{L}$ と LRL ベクトル $\boldsymbol{M}$ は直交すること、すなわち、

$$\boldsymbol{M}\cdot\boldsymbol{L} = \boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{M} = 0 \tag{3.8}$$

が成立することを確かめよう。

■問題 5

角運動量ベクトル $\boldsymbol{L}$ と LRL ベクトル $\boldsymbol{M}$ の各成分間の交換関係が、

$$[L_i, L_j] = \mathrm{i}\hbar \sum_m \epsilon_{ijm} L_m \tag{3.9}$$

$$[M_i, L_j] = \mathrm{i}\hbar \sum_k \epsilon_{ijk} M_k \tag{3.10}$$

$$[M_i, M_j] = -\frac{2}{m_e}\mathrm{i}\hbar H \sum_m \epsilon_{ijm} L_m \tag{3.11}$$

となることを確かめよう。

■問題 6

LRL ベクトルの自乗演算子は

$$\boldsymbol{M}^2 = \frac{2}{m_e}(\boldsymbol{L}^2 + \hbar^2)H + \kappa^2 \tag{3.12}$$

となることを確かめよう。古典版・量子版 LRL ベクトルで、$\boldsymbol{M}^2$ の表示がやや異なることがわかる。[*1]

3.3 $\mathfrak{so}(4)$ 代数の導入

3.3.1 生成子

4 次元ベクトル空間における回転操作を表す $SO(4)$ 群の生成子は $so(4)$ 代数の基底をなす。同ベクトル空間において原点を通り互いに直交する平面が ${}_4C_2 = 6$ 個存在するが、それぞれの平面の回転操作に対応した部分群を生成する 6 個の角運動量演算子が $SO(4)$ 群の生成子となる。角運動量演算子は、

$$L_{ij} = x_i p_j - x_j p_i \tag{3.13}$$

と書かれるが、生成子となるためにはこの中で 6 個の線形独立なものを選ぶ必要がある。指標 (i, j) の組を

$$(1,2), (2,3), (3,1), (1,4), (2,4), (3,4)$$

と選んだときこれらは線形独立である。

[*1] $\hbar \to 0$ の極限で古典版 LRL ベクトルの表示になる。

角運動量演算子（とくに独立な 6 個に限る訳ではない）については、次の交換関係が成立する。

$$\begin{aligned}[L_{ij}, L_{kl}] &= [x_i p_j, x_k p_l] - [x_j p_i, x_k p_l] - [x_i p_j, x_l p_k] + [x_j p_i, x_l p_k] \\ &= \frac{\hbar}{\mathrm{i}} \{\delta_{jk} L_{il} + \delta_{jl} L_{ki} + \delta_{ik} L_{lj} + \delta_{il} L_{jk}\} \end{aligned} \tag{3.14}$$

ここで、

$$L_{23} = L_1, L_{31} = L_2, L_{12} = L_3, L_{14} = \tilde{M}_1, L_{24} = \tilde{M}_2, L_{34} = \tilde{M}_3 \tag{3.15}$$

と置くとこれらの間の交換関係は、

$$[L_i, L_j] = \mathrm{i}\hbar \sum_m \epsilon_{ijm} L_m \tag{3.16}$$

$$\left[\tilde{M}_i, \tilde{L}_j\right] = \mathrm{i}\hbar \sum_m \epsilon_{ijm} \tilde{M}_m \tag{3.17}$$

$$\left[\tilde{M}_i, \tilde{M}_j\right] = \mathrm{i}\hbar \sum_m \epsilon_{ijm} L_m \tag{3.18}$$

のように整理される。

3.3.2 直和分解

$\mathfrak{so}(4)$ 代数は独立な $\mathfrak{su}(2)$ 代数の直和として表現することが出来る。以下にそれを示す。ベクトル

$$\boldsymbol{A} = \frac{1}{2}\left(\boldsymbol{L} + \tilde{\boldsymbol{M}}\right) \tag{3.19}$$

$$\boldsymbol{B} = \frac{1}{2}\left(\boldsymbol{L} - \tilde{\boldsymbol{M}}\right) \tag{3.20}$$

を導入すると依然として $\boldsymbol{A}, \boldsymbol{B}$ の各成分は線形独立である。このとき、$\boldsymbol{A}, \boldsymbol{B}$ の各成分について交換関係を計算すると、

$$[A_i, A_j] = \mathrm{i}\hbar \sum_m \epsilon_{ijm} A_m \tag{3.21}$$

$$[B_i, B_j] = \mathrm{i}\hbar \sum_m \epsilon_{ijm} B_m \tag{3.22}$$

$$[A_i, B_j] = 0 \tag{3.23}$$

となり、$\boldsymbol{A}, \boldsymbol{B}$ の各成分はそれぞれが独立に $\mathfrak{su}(2)$ 代数の基底となっており、部分代数を成していることが分かる。

3.3.3　既約表現

階数が 2 なので $\mathfrak{so}(4)$ 代数では独立な 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、$\mathfrak{so}(4)$ 代数の既約表現を考えたときにその表現空間では $\boldsymbol{A}^2$ や $\boldsymbol{B}$ 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 $\mathfrak{su}(2)$ 代数の既約表現空間は、非負の整数または半整数 l_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、

$$\boldsymbol{A}^2|l_a, m_a\rangle_a = l_a(l_a+1)\hbar^2|l_a, m_a\rangle_a \tag{3.24}$$

$$A_3|l_a, m_a\rangle_a = m_a\hbar|l_a, m_a\rangle_a \tag{3.25}$$

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、

$$\boldsymbol{B}^2|l_b, m_b\rangle_b = l_b(l_b+1)\hbar^2|l_b, m_b\rangle_b \tag{3.26}$$

$$B_3|l_b, m_b\rangle_b = m_b\hbar|l_b, m_b\rangle_b \tag{3.27}$$

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

$$\begin{aligned}&\{|l_a, m_a\rangle_a|l_b, m_b\rangle_b|\\ &m_a = -l_a, -l_a+1, \cdots, l_a-1, l_a, m_b = -l_b, -l_b+1, \cdots, l_b-1, l_b\}\end{aligned}$$

が $\mathfrak{so}(4)$ 代数の一つの既約表現に属する。

3.4 $\mathfrak{so}(4)$ 代数の水素様原子の解法への適用

3.4.1 Hilbert 空間の制限と $\mathfrak{so}(4)$ 代数の既約表現

$\boldsymbol{L}, \boldsymbol{M}$ はそのままの形では、$\mathfrak{so}(4)$ 代数の基底と見なすことが出来ない。式**??**の右辺はスカラーにならないことが障害となる。

そこで、演算子が作用する Hilbert 空間を限定する必要がある。$\boldsymbol{L}$ と H、$\boldsymbol{M}$ と H はそれぞれ同時対角化可能であることから、作用する同じエネルギー固有値を持つ縮退した状態からなる Hilbert 空間に限定したときに、式**??**の右辺で出てくる H をエネルギー固有値 E として置き換えることが可能である。さらに、式**??**についても置き換えが可能である。

束縛状態を考えると $E < 0$ である。規格化した LRL ベクトル $\tilde{\boldsymbol{M}}$ を

$$\boldsymbol{M} = \tilde{\boldsymbol{M}}\sqrt{\frac{-2E}{m_e}} \tag{3.28}$$

によって導入すると、$\boldsymbol{L}, \tilde{\boldsymbol{M}}$ の各成分は、$\mathfrak{so}(4)$ 代数の交換関係である式 3.16、3.17、3.18 を満足することがわかる。したがって、この固有エネルギーが等しい状態からなる Hilbert 空間は $\mathfrak{so}(4)$ 代数の一つの既約表現に属することが分かる。(さらなる縮退をもたらす別の対称性がなければという但し書きは付く。)

3.4.2 エネルギースペクトルの導出

上記の既約表現に属する Hilbert 空間を考える。このときエネルギー固有値は定まっており、

$$\begin{aligned}\tilde{\boldsymbol{M}}^2 &= \frac{m_e}{-2E}\left\{\frac{2}{m_e}(\boldsymbol{L}^2 + \hbar^2)E + \kappa^2\right\} \\ &= -\boldsymbol{L}^2 - \hbar^2 - \frac{m_e\kappa^2}{2E}\end{aligned} \tag{3.29}$$

となる。ここで、$\boldsymbol{L}^2, \tilde{\boldsymbol{M}}^2$ については、$\mathfrak{so}(4)$ 代数におけるカシミール演算子でなく、スカラーではないことに注意が必要である。

$\mathfrak{so}(4)$ 代数の導入で定義した $\boldsymbol{A}, \boldsymbol{B}$ について考える。まず、$\boldsymbol{A}^2$ は既約表現の中では

$$\begin{aligned}\boldsymbol{A}^2 &= \frac{1}{4}\left\{\boldsymbol{L}^2 + \tilde{\boldsymbol{M}}^2 + \boldsymbol{L}\cdot\tilde{\boldsymbol{M}} + \tilde{\boldsymbol{M}}\cdot\boldsymbol{L}\right\} \\ &= \frac{1}{4}\left(-\hbar^2 - \frac{m_e\kappa^2}{2E}\right)\end{aligned} \tag{3.30}$$

のようにスカラーとなる。同様に $\boldsymbol{B}^2$ については、

$$\boldsymbol{B}^2 = \frac{1}{4}\left(-\hbar^2 - \frac{m_e\kappa^2}{2E}\right) \tag{3.31}$$

となる。

式 3.30、3.31 より、実は $\boldsymbol{A}^2 = \boldsymbol{B}^2$ であることがわかる。したがって考えている Hilbert 空間は、$\mathfrak{so}(4)$ 代数の既約表現のうち $l_a = l_b$ という形式のものに属すことになる。すべての $\mathfrak{so}(4)$ 代数の既約表現が用いられる訳ではないということである。

考えている既約表現について、$l_a = l_b = \tilde{l}$ とする。このとき、

$$\hbar^2\tilde{l}(\tilde{l}+1) = \frac{1}{4}\left(-\hbar^2 - \frac{m_e\kappa^2}{2E}\right) \tag{3.32}$$

であるから、

$$E = -\frac{1}{2(2\tilde{l}+1)^2}\frac{m_e}{\hbar^2}\kappa^2 \tag{3.33}$$

となる。ここで $\tilde{l}$ は非負の整数あるいは半整数なので、$n := 2\tilde{l}+1$ は正整数となることがわかる。すなわち、n を正整数として、

$$E_n = -\frac{1}{2n^2}\frac{m_e}{\hbar^2}\kappa^2 = -\frac{1}{2n^2}\frac{m_e}{\hbar^2}\left(\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0}\right)^2 \tag{3.34}$$

が求めるべきエネルギースペクトルである。

縮重度は既約表現の次元であり、

$$(2\tilde{l}+1)(2\tilde{l}+1) = n^2 \tag{3.35}$$

となる。

第 4 章

連続状態とゼロエネルギー状態の力学的対称性

有限次元 Lie 代数を構築するために必要な操作は表現空間の制限である。すなわち、演算子が作用する表現空間をハミルトニアンの固有値が E となるような状態からなる部分ヒルベルト空間に制限する。すると、LRL ベクトルの成分同士の交換関係はこの空間においては

$$[M_i, M_j] = -2\mathrm{i}\hbar\frac{E}{m_e}\epsilon_{ijk}L_k \tag{4.1}$$

となる。これにより、6 つの演算子 $L_x, L_y, L_z, M_x, M_y, M_z$ で閉じた有限次元 Lie 代数を構成することができる。

4.1　力学的対称代数の構築

前節までで Lie 代数はほぼ構築できたと言える。しかしながらこの Lie 代数の正体はまだ不明である。実のところ固有値 E の符号によって異なる Lie 代数（Lie 代数同型の意味で）となるので、場合分けして調べる必要がある。

(1)$E < 0$ の時

これは束縛状態を考えることに相当する。この時

$$\tilde{\boldsymbol{M}} = \sqrt{\frac{m_e}{2|E|}}\boldsymbol{M} \tag{4.2}$$

とおくと、交換関係は

$$[L_i, L_j] = \mathrm{i}\hbar\epsilon_{ijk}L_k \tag{4.3}$$

$$\left[L_i, \tilde{M}_j\right] = \mathrm{i}\hbar\epsilon_{ijk}\tilde{M}_k \tag{4.4}$$

$$\left[\tilde{M}_i, \tilde{M}_j\right] = \mathrm{i}\hbar\epsilon_{ijk}L_k \tag{4.5}$$

の様に集約できる。これは四次元 Euclid 空間における（狭義）回転群 $SO(4)$ に対応する Lie 代数 $\mathfrak{so}(4)$ である。

(2)$E = 0$ の時

これは古典的には放物線軌道に相当する状態であり非束縛状態である。この時の交換関係は

$$[L_i, L_j] = \mathrm{i}\hbar\epsilon_{ijk}L_k \tag{4.6}$$

$$\left[L_i, \tilde{M}_j\right] = \mathrm{i}\hbar\epsilon_{ijk}\tilde{M}_k \tag{4.7}$$

$$\left[\tilde{M}_i, \tilde{M}_j\right] = 0 \tag{4.8}$$

の様に集約される。これは 3 次元 Euclid 空間の連続対称群 $ISO(3,1)$(Euclid 空間の連続対称性は回転対称性と並進対称性である。) に対応する Lie 代数 $\mathfrak{iso}(3,1)$ である。

(3)$E > 0$ の時

これは散乱状態を考えることに相当する。この時

$$\tilde{\boldsymbol{M}} = \sqrt{\frac{m_e}{2|E|}}\boldsymbol{M} \tag{4.9}$$

とおくと、交換関係は

$$[L_i, L_j] = \mathrm{i}\hbar\epsilon_{ijk}L_k \tag{4.10}$$

$$\left[L_i, \tilde{M}_j\right] = \mathrm{i}\hbar\epsilon_{ijk}\tilde{M}_k \tag{4.11}$$

$$\left[\tilde{M}_i, \tilde{M}_j\right] = -\mathrm{i}\hbar\epsilon_{ijk}L_k \tag{4.12}$$

の様に集約できる。これは $3+1-$Minkowski 空間における（狭義）回転群 $SO^+(3,1)$ に対応する Lie 代数 $\mathfrak{so}(3,1)$ である。

4.2　もう一つの LRL ベクトルと力学的対称代数の構築方法

実のところ（量子力学版の）LRL ベクトルと呼ばれるものにはもう一つある。すなわち、

$$\boldsymbol{M}=\frac{1}{2}\left\{\frac{1}{2m_e}\left(\boldsymbol{x}p^2-2(\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{p})\boldsymbol{p}\right)+xH\right\}+\mathrm{h.c.} \tag{4.13}$$

において $H=E$ とすることで得られる演算子

$$\boldsymbol{M}(E)=\frac{1}{2}\left\{\frac{1}{2m_e}\left(\boldsymbol{x}p^2-2(\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{p})\boldsymbol{p}\right)+xE\right\}+\mathrm{h.c.} \tag{4.14}$$

も LRL ベクトルと呼ばれる。ここで、E はある実数であり特にハミルトニアンの固有値である必要は特にはない。この LRL ベクトルは水素原子のスペクトルを Fock の方法で計算するときに出てくるものであり、Bargmann が導出した。この LRL ベクトルが関わる交換関係は

$$[L_i,M_j(E)]=\mathrm{i}\hbar\epsilon_{ijk}M_k(E) \tag{4.15}$$

$$[M_i(E),M_j(E)]=-2\mathrm{i}\hbar\frac{E}{m_e}\epsilon_{ijk}L_k \tag{4.16}$$

となる。このことから L_x,L_y,L_z,M_x,M_y,M_z も有限次元 Lie 代数をなすことがわかる。

先の節までの LRL ベクトルと同様に E の符号によって異なる Lie 代数（Lie 代数同型の意味で）となるので、場合分けして調べる必要がある。

(1)$E<0$ の時

この時

$$\boldsymbol{M}_<(E)=\sqrt{\frac{m_e}{2|E|}}\boldsymbol{M}(E) \tag{4.17}$$

とおくと、交換関係は

$$[L_i,L_j]=\mathrm{i}\hbar\epsilon_{ijk}L_k \tag{4.18}$$

$$[L_i,M_{<,j}(E)]=\mathrm{i}\hbar\epsilon_{ijk}M_{<,k}(E) \tag{4.19}$$

$$[M_{<,i}(E),M_{<,j}(E)]=\mathrm{i}\hbar\epsilon_{ijk}L_k \tag{4.20}$$

の様に集約できる。これは四次元 Euclid 空間における（狭義）回転群 $SO(4)$ に対応する Lie 代数 $\mathfrak{so}(4)$ である。

(2)$E = 0$ の時

これは古典的には放物線軌道に相当する状態であり非束縛状態である。この時の交換関係は

$$[L_i, L_j] = \mathrm{i}\hbar\epsilon_{ijk}L_k \tag{4.21}$$

$$[L_i, M_j(0)] = \mathrm{i}\hbar\epsilon_{ijk}M_k(0) \tag{4.22}$$

$$[M_i(0), M_j(0)] = 0 \tag{4.23}$$

の様に集約される。これは 3 次元 Euclid 空間の連続対称群 $ISO(3,1)$ に対応する Lie 代数 $\mathfrak{iso}(3,1)$ である。

(3) $E > 0$ の時

これは散乱状態を考えることに相当する。この時

$$\boldsymbol{M}_>(E) = \sqrt{\frac{m_e}{2|E|}}\boldsymbol{M}(E) \tag{4.24}$$

とおくと、交換関係は

$$[L_i, L_j] = \mathrm{i}\hbar\epsilon_{ijk}L_k \tag{4.25}$$

$$[L_i, M_{>,j}(E)] = \mathrm{i}\hbar\epsilon_{ijk}M_{>,k}(E) \tag{4.26}$$

$$[M_{>,i}(E), M_{>,j}(E)] = -\mathrm{i}\hbar\epsilon_{ijk}L_k \tag{4.27}$$

の様に集約できる。これは $3+1$Minkowski 空間における（狭義）回転群 $SO^+(3,1)$ に対応する Lie 代数 $\mathfrak{so}(3,1)$ である。

第 5 章

スペクトル生成代数 $\mathfrak{su}(1,1)$ を利用した解法

本章は主に [23, 33] を参考にしている。

5.1　変数分離

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

$$\left[\frac{d^2}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{d}{dr}-\frac{\boldsymbol{L}^2}{\hbar^2 r^2}+\frac{2\kappa}{r}\frac{m_e}{\hbar^2}+2E\frac{m_e}{\hbar^2}\right]\Psi(\boldsymbol{r})=0 \tag{5.1}$$

のように書き換えられる。

したがって、動径部分の固有値方程式

$$\left[r\frac{d^2}{dr^2}+2\frac{d}{dr}-\frac{l(l+1)}{r}+2\kappa\frac{m_e}{\hbar^2}+2E\frac{m_e}{\hbar^2}r\right]R_l(r)=0 \tag{5.2}$$

に帰着する。

さらに $\beta>0$ を

$$\beta^2=-\frac{\kappa^2}{2E}\frac{m_e}{\hbar^2}(>0) \tag{5.3}$$

を満たす数、$\alpha>0$ を

$$\alpha^2=-2E\frac{m_e}{\hbar^2}=\left(\frac{m_e\kappa}{\beta\hbar^2}\right)^2 \tag{5.4}$$

を満たす数とすると、式 5.2 は、

$$\frac{1}{2}\left[-r\frac{d^2}{dr^2}-2\frac{d}{dr}+\frac{l(l+1)}{r}+\alpha^2 r\right]R_l(r)=\alpha\beta R_l(r) \tag{5.5}$$

となる。さらに変数変換

$$t=\alpha r \tag{5.6}$$

を行うと、

$$\frac{1}{2}\left[-t\frac{d^2}{dt^2}-2\frac{d}{dt}+\frac{l(l+1)}{t}+t\right]R_l(t/\alpha)=\beta R_l(t/\alpha) \tag{5.7}$$

と変換できる。

以下、この固有値方程式 5.7 を解く。

5.2 $\mathfrak{su}(1,1)$ 代数の導入

$\mathfrak{su}(1,1)$ 代数は三次元ベクトル空間上で定義される Lie 代数であり、生成子 N_0, N_1, N_2 に対して、

$$[N_1,N_2]=-\mathrm{i}N_0,\ [N_0,N_1]=\mathrm{i}N_2,\ [N_2,N_0]=\mathrm{i}N_1 \tag{5.8}$$

が成立するものである。第一式の右辺の符号が + となった場合は、$\mathfrak{su}(2)$ 代数になる。

$\mathfrak{su}(2)$ と $\mathfrak{su}(1,1)$ は次元が同じだが、性質が著しく異なる部分がある。すなわち、$\mathfrak{su}(2)$ から生成される Lie 群がコンパクトであるのにたいして、$\mathfrak{su}(1,1)$ ではノンコンパクトとなる。それに伴って既約ユニタリ表現空間の次元が $\mathfrak{su}(1,1)$ では無限となる。

$\mathfrak{su}(2)$ 代数同様、昇降演算子を定義できる。$N_\pm = N_1 \pm \mathrm{i}N_2$ としたときに、

$$[N_0,N_\pm]=\pm N_\pm,\ [N_+,N_-]=-2N_0,\ N_+^\dagger=N_- \tag{5.9}$$

が成立する。さらに、全ての生成子との Lie ブラケット演算が 0 となるような Casimir 演算子が存在する。すなわち、

$$C=N_0^2-N_1^2-N_2^2=N_0^2-\frac{1}{2}\left(N_+N_-+N_-N_+\right) \tag{5.10}$$

が Casimir 演算子である。所々で、やはり $\mathfrak{su}(2)$ のものとは符号が異なっているので注意されたい。

ユニタリ表現は C, N_0 の同時固有状態として、記述することができる。

$$\begin{aligned} C|k,m'\rangle &= k(k-1)|k,m'\rangle \\ N_0|k,m'\rangle &= (k+m')|k,m'\rangle \end{aligned} \tag{5.11}$$

$k > 0$ は実数、m' は非負整数である。k が同じ固有状態は、同じ既約表現に属する。

対応する固有状態は昇演算子を用いて、

$$|k,m'\rangle = \sqrt{\frac{\Gamma(2k)}{m'!\Gamma(2k+m')}}\,(N_+)^{m'}\,|k,0\rangle \tag{5.12}$$

のように表す事ができる。これは、

$$N_-N_+ = N_0^2 + N_0 - C \tag{5.13}$$

$$\langle k,m'|N_-N_+|k,m'\rangle = (m'+1)(2k+m') \tag{5.14}$$

などから求めることができる。

5.3 $\mathfrak{su}(1,1)$ 解法

まず、元の動径部分微分方程式 5.7 の固有関数が重み 1 で直交系をなすように微分方程式を変形するのだが、これは難しくはない。すなわち、l を同じくする固有関数は r を重みとして直交系を成すのだから、これらの固有関数に $r^{\frac{1}{2}}$ を掛けたものは重み 1 で直交系を成すはずであり、これを解とするような固有方程式を作れば良い。そのためには

$$\psi_l(t) = t^{\frac{1}{2}} R_l(t/\alpha) \tag{5.15}$$

を導入する。これらは微分方程式

$$\frac{1}{2}\left[-t\frac{d^2}{dt^2} - \frac{d}{dt} + \frac{\left(l+\frac{1}{2}\right)^2}{t} + t\right]\psi_l(t) = \beta\psi_l(t) \tag{5.16}$$

を満たす。この l を同じくする方程式の固有関数は、直交系をなすことになる。

ここで 5.16 左辺を N_0、すなわち、

$$N_0 = \frac{1}{2}\left[-t\frac{d^2}{dt^2} - \frac{d}{dt} + \frac{\left(l+\frac{1}{2}\right)^2}{t} + t\right] \tag{5.17}$$

とする。さらに

$$N_+ = \frac{1}{2}\left[-t\frac{d^2}{dt^2} - \frac{d}{dt} + \frac{\left(l+\frac{1}{2}\right)^2}{t} - t + 2t\frac{d}{dt} + 1\right] \tag{5.18}$$

とおくと、

$$\left[t\frac{d^2}{dt^2}\right]^\dagger = 2\frac{d}{dt} + t\frac{d^2}{dt^2},\ \left[t\frac{d}{dt}\right]^\dagger = -t\frac{d}{dt} - 1,\ \left[\frac{d}{dt}\right]^\dagger = -\frac{d}{dt}$$

により、

$$N_+^\dagger = \frac{1}{2}\left[-t\frac{d^2}{dt^2} - \frac{d}{dt} + \frac{\left(l+\frac{1}{2}\right)^2}{t} - t - 2t\frac{d}{dt} - 1\right]$$

となる。

$N_+^\dagger = N_-$ とみなすと、式 5.9

$$[N_0, N_\pm] = \pm N_\pm, [N_+, N_-] = -2N_0, N_+^\dagger = N_-$$

が成立することがわかる。従って、$N_1 \pm \mathrm{i}N_2 = N_\pm$ となる N_1N_2 と N_0 は $\mathfrak{su}(1,1)$ 代数の基底となることがわかる。

ここで Casimir 演算子は計算により

$$\begin{aligned} C &= N_0^2 - \frac{1}{2}\left(N_+N_- + N_-N_+\right) \\ &= l(l+1) \end{aligned} \tag{5.19}$$

となることがわかる。

式 5.11 の表記を用いると、$k = l+1, m' = \beta - l - 1$ の時 5.16 の解となり、

$$\begin{aligned} C|l+1, \beta-l-1\rangle &= l(l+1)|l+1, \beta-l-1\rangle \\ N_0|l+1, \beta-l-1\rangle &= \beta|l+1, \beta-l-1\rangle \end{aligned} \tag{5.20}$$

となる。ここで $k = l+1 > 0$ は成立している。また、β としては $l+1$ 以上の整数が許される。これを N と書いて、対応する E, α を E_N, α_N と書くと、

$$E_N = -\frac{1}{2N^2}\frac{m_e}{\hbar^2}\kappa^2 \tag{5.21}$$

$$\alpha_N = \frac{m_e\kappa}{N\hbar^2} \tag{5.22}$$

となる。すなわち、Schrödinger の解法の解と一致する。

また、N に対応する ψ_l を $\psi_{N,l}$ とかくと、

$$\psi_{N,l} = |l+1, N-l-1\rangle \tag{5.23}$$

となる。

ここで導入された $\mathfrak{su}(1,1)$ の演算子たちの中でも K_+, K_- はそれぞれエネルギーの上昇演算子、下降演算子を表している。エネルギーの異なる状態を結びつける働きをする演算子を含むこの Lie 代数のことをスペクトル生成代数と呼び、演算子たちをスペクトル生成演算子と呼ぶことがある。

5.4　三状態に関する $\mathfrak{su}(1,1)$ 解法の適用可能性について

ゼロエネルギー状態は

$$\frac{1}{2}(N_0 + N_1)\psi_l(t) = \psi_l(t) \tag{5.24}$$

散乱状態は

$$N_1\psi_l(t) = \beta\psi_l(t) \tag{5.25}$$

という固有値問題[*1]となる。

■問題 1　なぜそうなるのか考えてみよう。

三状態を記述するために必要な $\mathfrak{su}(1,1)$ のユニタリ既約表現は異なる。それについては Lindblad–Nagel[24] に詳しい。

[*1] 正しくは一般化スペクトルを考える必要がある

第 6 章

水素原子に潜む共形幾何学

本章は [33, 35] を主に参考にしている。

6.1 共形変換代数

Minkowski 空間 $\mathbb{R}^{1,3}$ における Maxwell 方程式は Lorentz 対称性に加えて共形対称性（conformal symmetry）をもつ。共形対称性に対応する共形変換代数 $\mathfrak{so}(4,2)$ について議論する。

この節では Einstein の縮約が使われる。テンソルの上付き添え字は反変成分に、下付き添え字は共変成分に対応する。ここで計量テンソル η を導入したが、これを行列として表示した場合に

$$\eta = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \mathrm{diag}(-1,1,1,1) \tag{6.1}$$

となるように定義している。時間成分は第 0 成分、空間成分は第 1,2,3 成分とする。また反変ベクトルに対して、x^2 は $x^\mu x_\mu = \eta_{\mu\nu}x^\mu x^\nu$ を表すものとする。

6.1.1 Minkowski 計量を保つ微小な線形座標変換

微小な線形座標変換

$$dx'^\nu = \Lambda^\nu{}_\mu dx^\mu = (\delta^\nu{}_\mu + L^\nu{}_\mu)dx^\mu \tag{6.2}$$

について考える。微小座標変換が Minkowski 計量 $\eta_{\mu\nu}dx^\mu dx^\nu$ を保つとは、

$$\eta_{\mu\nu}dx^\mu dx^\nu = \eta_{\mu\nu}dx'^\mu dx'^\nu = \eta_{\mu\nu}\Lambda^\mu{}_\rho\Lambda^\nu{}_\sigma dx^\rho dx^\sigma \tag{6.3}$$

$O(L)$ の範囲で成立することを言う。このとき、右辺において $O(L^2)$ となる項を無視すると、

$$\begin{aligned}\eta_{\mu\nu}dx^\mu dx^\nu &= \eta_{\mu\nu}\Lambda^\mu{}_\rho\Lambda^\nu{}_\sigma dx^\rho dx^\sigma \\ &= (\eta_{\rho\sigma} + \eta_{\rho\nu}L^\nu{}_\sigma + \eta_{\mu\sigma}L^\mu{}_\rho)dx^\rho dx^\sigma\end{aligned} \tag{6.4}$$

が成立する。すなわち、

$$(L_{\rho\sigma} + L_{\sigma\rho})dx^\rho dx^\sigma = 0 \tag{6.5}$$

が成立し、L が反対称テンソルであることすなわち、

$$L_{\rho\sigma} + L_{\sigma\rho} = 0 \tag{6.6}$$

が要請される。Minkowski 計量を保つ微小な線形変換は、Minkowski 空間における狭義回転すなわち狭義 Lorentz 変換に対応する。

6.1.2 狭義 Lorentz 変換と Lie 代数 $\mathfrak{so}(3,1) \simeq \mathfrak{sl}(2,\mathbb{C})$

狭義回転演算子を L としたとき、これに期待される役割は $O(L)$ の範囲で反対称テンソル $L^\rho{}_\mu$ を用いて

$$e^{-\mathrm{i}L}x^\rho e^{\mathrm{i}L} = (\delta^\rho{}_\mu + L^\rho{}_\mu)x^\mu \tag{6.7}$$

と書けること、すなわち反対称テンソル $L^\rho{}_\mu$ を用いて

$$[L, x^\rho] = \mathrm{i}L^\rho{}_\mu x^\mu \tag{6.8}$$

と書けることである。このとき、L は、

$$L = \mathrm{i}x^\mu L^\nu{}_\mu \frac{\partial}{\partial x^\nu} = \mathrm{i}x_\mu L^{\nu\mu}\frac{\partial}{\partial x^\nu} = -\mathrm{i}x_\mu L^{\mu\nu}\frac{\partial}{\partial x^\nu} \tag{6.9}$$

と書ける。ここで、狭義回転演算子

$$M_{\mu\nu} = -\mathrm{i}\eta_{\mu\alpha}x^\alpha\frac{\partial}{\partial x^\nu} + \mathrm{i}\eta_{\nu\alpha}x^\alpha\frac{\partial}{\partial x^\mu} = -\mathrm{i}x_\mu\frac{\partial}{\partial x^\nu} + \mathrm{i}x_\nu\frac{\partial}{\partial x^\mu} \tag{6.10}$$

を導入すると、

$$L = -\mathrm{i}x_\mu L^{\mu\nu}\frac{\partial}{\partial x^\nu} = \frac{1}{2}L^{\mu\nu}M_{\mu\nu} \tag{6.11}$$

が成立する。

ここで、$M_{\mu\nu}$ 同士の交換関係を Lie ブラケットと解釈すると、これらの演算子は Lie 代数 $\mathfrak{so}(3,1) \simeq \mathfrak{sl}(2,\mathbb{C})$ をなすことがわかる。すなわち、

$$[M_{\mu\nu}, M_{\rho\sigma}] = \mathrm{i}\eta_{\mu\rho}M_{\nu\sigma} - \mathrm{i}\eta_{\nu\rho}M_{\mu\sigma} - \mathrm{i}\eta_{\mu\sigma}M_{\nu\rho} + \mathrm{i}\eta_{\nu\sigma}M_{\mu\rho} \tag{6.12}$$

が成立する。また、$M_{\mu\nu} \quad (\mu < \nu)$ は基底をなし、Lie 代数の次元は 6 であることもわかる。

6.1.3 並進演算子

Minkowski 空間は並進対称性をもつ。並進演算子を P としたとき、これに期待される役割は $O(\epsilon)$ の範囲で

$$e^{-\mathrm{i}P}x^\rho e^{\mathrm{i}P} = x^\rho + \epsilon^\rho \tag{6.13}$$

と書けること、すなわち

$$[P, x^\rho] = \mathrm{i}\epsilon^\rho \tag{6.14}$$

と書けることである。このとき、P は、

$$P = \mathrm{i}\epsilon^\mu \frac{\partial}{\partial x^\mu} \tag{6.15}$$

と書ける。ここで、並進演算子

$$P_\mu = \mathrm{i}\frac{\partial}{\partial x^\mu} \tag{6.16}$$

を導入すると、

$$P = \epsilon^\mu P_\mu \tag{6.17}$$

と書ける。明らかに

$$[P_\mu, P_\nu] = 0 \tag{6.18}$$

である。

6.1.4 Poincaré 対称性と Lie 代数 $\mathfrak{iso}(3,1)$

並進演算子と狭義 Lorentz 変換演算子がなす代数は Poincaré 代数と呼ばれ、Minkowski 空間の対称性である Poincaré 対称性を記述する。両演算子の間では交換関係

$$[M_{\mu\nu}, P_\rho] = \mathrm{i}\eta_{\mu\rho}P_\nu - \mathrm{i}\eta_{\nu\rho}P_\mu \tag{6.19}$$

が成立する。Poincaré 代数は Lie 代数としては $\mathfrak{iso}(3,1)$ と同型である。

6.1.5 Minkowski 計量が 0 の場合にこれを保つ微小線形変換

再び微小な線形座標変換

$$dx'^\nu = \Lambda^\nu{}_\mu dx^\mu = (\delta^\nu{}_\mu + L^\nu{}_\mu)dx^\mu \tag{6.20}$$

について考える。微小座標変換が Minkowski 距離 $\eta_{\mu\nu}dx^\mu dx^\nu = 0$ を保つとは、

$$\eta_{\mu\nu}dx^\mu dx^\nu = \eta_{\mu\nu}dx'^\mu dx'^\nu = \eta_{\mu\nu}\Lambda^\mu{}_\rho\Lambda^\nu{}_\sigma dx^\rho dx^\sigma = 0 \tag{6.21}$$

が $O(L)$ の範囲で成立することを言う。このとき、狭義 Lorentz 変換に対応する微小線形変換に限らず、

$$L_{\rho\sigma} \propto \eta_{\rho\sigma}$$

のときも成立する。これは計量を定数倍するものであり、スケール変換あるいは伸長変換（dilation）に対応するものである。

■伸長（dilation あるいは dilatatioin）演算子

座標を $(1+\epsilon)$ 倍する伸長演算子を $D(1+\epsilon)$ としたとき、これに期待される役割は $O(\epsilon)$ の範囲で

$$e^{-\mathrm{i}D(1+\epsilon)}x^\rho e^{\mathrm{i}D(1+\epsilon)} = (1+\epsilon)x^\rho \tag{6.22}$$

と書けること、すなわち

$$[D(1+\epsilon), x^\rho] = \mathrm{i}\epsilon x^\rho \tag{6.23}$$

と書けることである。すなわち、伸長演算子

$$D = \mathrm{i}x^\mu \frac{\partial}{\partial x^\mu} \tag{6.24}$$

を導入して、

$$D(1+\epsilon) = \epsilon D \tag{6.25}$$

と書ける。伸長演算子と Poincaré 代数を合わせた Lie 代数においては、交換関係が

$$[D, M_{\mu\nu}] = 0 \tag{6.26}$$

$$[D, P_\mu] = -\mathrm{i}P_\mu \tag{6.27}$$

のように計算されるこの Lie 代数はスケール不変性を保つ理論について議論する際に必要となる。

■反転演算子

反転変換（inversion）あるいは反転演算子という概念を導入する。共形対称性を保つ理論を考える際には必須となる演算子である。離散変換

$$I : x^\nu \mapsto \frac{x^\nu}{x^2} \tag{6.28}$$

を反転変換と呼び、対応する演算子を反転演算子と呼ぶ。反転演算子は

$$I^2 = 1 \tag{6.29}$$

となる性質を持つ。また、$y = Ix$ とした時に座標変換のヤコビアンは

$$\frac{\partial y^\nu}{\partial x^\mu} = \frac{1}{x^2}\left(\delta^\nu_\mu - \frac{2x^\nu x_\mu}{x^2}\right) \tag{6.30}$$

である。

■伸長演算子と反転演算子の関係

次の式が成立する。

$$IDI = -D \tag{6.31}$$

この式は、$y = Ix$ とした時に、

$$
\begin{aligned}
DIf(x) &= \mathrm{i}x^{\mu}\frac{\partial}{\partial x^{\mu}}f(y) && (6.32)\\
&= \mathrm{i}x^{\mu}\frac{\partial f}{\partial y^{\nu}}(y)\frac{\partial y^{\nu}}{\partial x^{\mu}} && (6.33)\\
&= \mathrm{i}x^{\mu}\frac{\partial f}{\partial y^{\nu}}(y)\frac{1}{x^2}\left(\delta^{\nu}_{\mu}-\frac{2x^{\nu}x_{\mu}}{x^2}\right) && (6.34)\\
&= -\mathrm{i}\frac{\partial f}{\partial y^{\nu}}(y)\frac{x^{\nu}}{x^2} && (6.35)\\
&= -\mathrm{i}\frac{\partial f}{\partial y^{\nu}}(y)y^{\nu} && (6.36)
\end{aligned}
$$

が成立し、

$$
IDIf(x) = -\mathrm{i}I(y^{\nu}\frac{\partial f}{\partial y^{\nu}}(y)) = -\mathrm{i}x^{\nu}\frac{\partial f}{\partial x^{\nu}}(x) = -Df(x) \tag{6.37}
$$

となる。二つ目の等号では $Iy = x$ を用いている。

■特殊共形変換演算子

反転演算子 I は原点の変換について特異的な性質を持っており、扱いやすいものではない。ところが $K_{\mu} = IP_{\mu}I$ のような演算子を考えると、これは特異性を持たない。この演算子を特殊共形変換演算子と呼ぶ。この演算子を求めよう。まず、

$$
P_{\mu}If(x) = \mathrm{i}\frac{\partial f}{\partial y^{\nu}}(y)\frac{1}{x^2}\left(\delta^{\nu}_{\mu}-2y^{\nu}x_{\mu}\right) \tag{6.38}
$$

となる。ここで $Ix^2 = \frac{1}{x^2}$ を用いると、

$$
IP_{\mu}If(x) = \mathrm{i}\frac{\partial f}{\partial x^{\nu}}(x)\left(x^2\delta^{\nu}_{\mu}-2x^{\nu}x_{\mu}\right) \tag{6.39}
$$

となる。すなわち、

$$
K_{\mu} = \mathrm{i}\left(x^2\delta^{\nu}_{\mu}-2x^{\nu}x_{\mu}\right)\frac{\partial}{\partial x^{\nu}} \tag{6.40}
$$

となる。

6.1.6　共形変換代数 $\mathfrak{so}(4,2)$

Poincaré 代数の各演算子と伸長演算子と特殊共形変換演算子がなす代数を共形変換代数という。次の交換関係が成立する。

$$[D, K_\mu] = \mathrm{i}K_\mu \tag{6.41}$$

$$[K_\mu, K_\nu] = 0 \tag{6.42}$$

$$[P_\mu, K_\nu] = -2\mathrm{i}M_{\mu\nu} - 2\mathrm{i}\eta_{\mu\nu}D \tag{6.43}$$

$$[M_{\mu\nu}, K_\rho] = \mathrm{i}\eta_{\mu\rho}K_\nu - \mathrm{i}\eta_{\nu\rho}K_\mu \tag{6.44}$$

したがって、$a \neq 0$ とすると、

$$\begin{aligned}\left[\frac{1}{2}\left(aK_\mu - a^{-1}P_\mu\right), \frac{1}{2}\left(aK_\nu + a^{-1}P_\nu\right)\right] &= -\frac{1}{4}\left([P_\mu, K_\nu] + [P_\nu, K_\mu]\right) \\ &= \mathrm{i}D\eta_{\mu\nu}\end{aligned} \tag{6.45}$$

$$\left[\frac{1}{2}\left(aK_\mu \pm a^{-1}P_\mu\right), D\right] = \mathrm{i}\frac{1}{2}\left(aK_\mu \mp a^{-1}P_\mu\right) \tag{6.46}$$

といった式が成立する。

共形変換代数は Lie 代数としては $\mathfrak{so}(4,2)$ と同型であるが、それを見通しよくするために、$0 \leq \mu, \nu \leq 3$ として、

$$M_{4\ -1} := D \tag{6.47}$$

$$M_{\mu\ -1} := \frac{1}{2}(aK_\mu + a^{-1}P_\mu) \tag{6.48}$$

$$M_{\mu\ 4} := \frac{1}{2}(aK_\mu - a^{-1}P_\mu) \tag{6.49}$$

を導入する。これを用いると、$M_{\mu\nu}$ $(-1 \leq \mu < \nu \leq 4)$ は共形変換代数の基底をなすことがわかる。(次元は 15) そして、元の計量テンソルを拡張した新たな 6 次元の計量テンソル η を導入する。

$$\eta = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{6.50}$$

$$= \mathrm{diag}(-1, -1, 1, 1, 1, 1) \tag{6.51}$$

負の符号をもつ第 (−1) 成分と、正の符号をもつ第 4 成分が加わったことになる。この計量テンソルを用いると、交換関係は

$$[M_{\mu\nu}, M_{\rho\sigma}] = \mathrm{i}\eta_{\mu\rho}M_{\nu\sigma} - \mathrm{i}\eta_{\nu\rho}M_{\mu\sigma} - \mathrm{i}\eta_{\mu\sigma}M_{\nu\rho} + \mathrm{i}\eta_{\nu\sigma}M_{\mu\rho} \tag{6.52}$$

のように統一的に書かれることがわかる。すなわち共形変換代数が Lie 代数としては $\mathfrak{so}(4,2)$ と同型であることが明確となった。

共形変換代数は任意の次元の Euclid 空間 $\mathbb{R}^n$ や Lorentz 空間 $\mathbb{R}^{p,q}$ に一般化できる。すなわち、Minkowski 空間 $\mathbb{R}^{1,3}$ に対するのと同様の手法で共形変換代数を構成できる。Euclid 空間 $\mathbb{R}^n$ の場合は共形変換代数は、$\mathfrak{so}(n+1,1)$ となり、Lorentz 空間 $\mathbb{R}^{p,q}$ の場合は共形変換代数は、$\mathfrak{so}(p+1,q+1)$ となる。[*1]

共形変換代数 $\mathfrak{so}(p,q)$ は Minkowski 空間の狭義回転群 $SO^+(p+1,q+1)$ と局所同型となる共形変換群 $C(p,q)$ を生成することが知られている。共形変換群とは共形平坦空間[*2]であることを保つ微分同相群である。共系変換群はスケール不変の物理現象、例えば臨界現象の記述に役立つ。$3+1$Minkowski 空間に対応する共形変換群 $C(3,1)$ の場合、四重被覆群が $SU(2,2)$ となり、これはツイスター空間 $\mathbb{C}^{2,2}$ におけるエルミート内積を保つ群となり、この事実はツイスター理論において重要となる [41]。

[*1] 実は $1+1$ 次元 Minkowski あるいは 2 次元 Lorentz 空間については Virasoro 代数という無限次元 Lie 代数が共形変換代数となる。

[*2] η を Minkowski 空間の計量をとした時に、計量が $g_{\mu\nu}(x) = \eta_{\mu\nu}\omega^2(x)$ となるような計量空間

6.2　水素原子における共形幾何学構造

6.2.1　運動量表示で見える、水素原子の $\mathfrak{so}(4,1)$ 構造

この節では $i=1,2,3$ とする。[*3]位置演算子や角運動量演算子は運動量表示では

$$x_i = \mathrm{i}\hbar \frac{\partial}{\partial p_i} \tag{6.53}$$

$$L_{ij} = x_i p_j - x_j p_i = \mathrm{i}\hbar \left(-p_i \frac{\partial}{\partial p_j} + p_j \frac{\partial}{\partial p_i} \right) \tag{6.54}$$

となる。新たに

$$D = \boldsymbol{p} \cdot \boldsymbol{x} = \mathrm{i}\hbar p_i \frac{\partial}{\partial p_i} \tag{6.55}$$

$$K_i = p^2 x_i - 2p_i(\boldsymbol{p} \cdot \boldsymbol{x}) = \mathrm{i}\hbar \left(p^2 \frac{\partial}{\partial p_i} - 2p_i p_j \frac{\partial}{\partial p_j} \right) \tag{6.56}$$

を定義する。

前節の議論において x を p に形式的に置き換えて、$\eta_{ij} = \delta_{ij}$ とすれば、

$$[L_{ij}, L_{kl}] = \mathrm{i}\hbar\delta_{ik}L_{jl} - \mathrm{i}\hbar\delta_{jk}L_{il} - \mathrm{i}\hbar\delta_{il}L_{jk} + \mathrm{i}\hbar\delta_{jl}L_{ik} \tag{6.57}$$

$$[x_i, x_j] = [K_i, K_j] = [D, L_{ij}] = 0 \tag{6.58}$$

$$[L_{ij}, x_k] = \mathrm{i}\hbar\delta_{ik}x_j - \mathrm{i}\hbar\delta_{jk}x_i,\ [L_{ij}, K_k] = \mathrm{i}\hbar\delta_{ik}K_j - \mathrm{i}\hbar\delta_{jk}K_i \tag{6.59}$$

$$[D, x_i] = -\mathrm{i}\hbar x_i,\ [D, K_i] = \mathrm{i}\hbar K_i,\ [x_i, K_j] = -2\mathrm{i}\hbar L_{ij} - 2\mathrm{i}\hbar\delta_{ij}D \tag{6.60}$$

となる。先の議論のように

$$M_{ij} := L_{ij}/\hbar \tag{6.61}$$

$$M_{45} := D/\hbar \tag{6.62}$$

$$M_{i5} := \frac{1}{2\hbar}(aK_i + a^{-1}x_i) \tag{6.63}$$

$$M_{i4} := \frac{1}{2\hbar}(aK_i - a^{-1}x_i) \tag{6.64}$$

[*3] 反変も共変も全て下付き添え字で書く。

$$\eta = \mathrm{diag}(1,1,1,1,-1) \tag{6.65}$$

としてやると、[*4]

$$[M_{\mu\nu}, M_{\rho\sigma}] = \mathrm{i}\eta_{\mu\rho}M_{\nu\sigma} - \mathrm{i}\eta_{\nu\rho}M_{\mu\sigma} - \mathrm{i}\eta_{\mu\sigma}M_{\nu\rho} + \mathrm{i}\eta_{\nu\sigma}M_{\mu\rho} \tag{6.66}$$

となり、これらが 3 次元運動量空間の共形変換代数 $\mathfrak{so}(4,1)$ をなすことがわかる。

ここで演算子の Hermite 化について述べる。L_{ij}, x_i は Hermite 演算子であるが、D と K_i は Hermite 演算子ではない。そこで、Hermite 化した演算子

$$D^H = \frac{D + D^\dagger}{2} \tag{6.67}$$

$$K_i^H = \frac{K_i + K_i^\dagger}{2} \tag{6.68}$$

を導入する。このとき、上の議論で D を D^H、K_i を K_i^H とした場合も $\mathfrak{so}(4,1)$ 代数となることを確かめることができる。

Hermite 化演算子を用いると、LRL ベクトル

$$\boldsymbol{M}(E) = \frac{1}{2}\left\{\frac{1}{2m_e}\left(\boldsymbol{x}p^2 - 2(\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{p})\boldsymbol{p}\right) + xE\right\} + \mathrm{h.c.} \tag{6.69}$$

は、

$$\boldsymbol{M}(E) = \frac{1}{2m_e}\boldsymbol{K}^H + E\boldsymbol{x} \tag{6.70}$$

と表される。すなわち、LRL ベクトルは実は 3 次元運動量空間中で特殊共形変換の働きを内包しているのである。ここで $a = 1/\sqrt{2m_e|E|}$ とすると、

$$\boldsymbol{M}_>(|E|) = \sqrt{\frac{m_e}{2|E|}}\boldsymbol{M}(|E|) = \frac{1}{2}\left(a\boldsymbol{K}^H + a^{-1}\boldsymbol{x}\right)$$
$$\boldsymbol{M}_<(-|E|) = \sqrt{\frac{m_e}{2|E|}}\boldsymbol{M}(-|E|) = \frac{1}{2}\left(a\boldsymbol{K}^H - a^{-1}\boldsymbol{x}\right)$$

となり、

$$M_{ij} := L_{ij}/\hbar \tag{6.71}$$
$$M_{45} := D/\hbar \tag{6.72}$$
$$M_{i5} := M_{>,i}(-|E|)/\hbar \tag{6.73}$$
$$M_{i4} := M_{<,i}(-|E|)/\hbar \tag{6.74}$$

[*4] ただし $i, j = 1, 2, 3$

$$\eta = \mathrm{diag}(1,1,1,1,-1) \tag{6.75}$$

としてやると、[*5]

$$[M_{\mu\nu}, M_{\rho\sigma}] = \mathrm{i}\eta_{\mu\rho}M_{\nu\sigma} - \mathrm{i}\eta_{\nu\rho}M_{\mu\sigma} - \mathrm{i}\eta_{\mu\sigma}M_{\nu\rho} + \mathrm{i}\eta_{\nu\sigma}M_{\mu\rho} \tag{6.76}$$

となり、これらが 3 次元運動量空間の共形変換代数 $\mathfrak{so}(4,1)$ をなすことがわかる。

この $\mathfrak{so}(4,1)$ を考える意義は、水素原子における 3 種類の状態の対称性 Lie 代数 $\mathfrak{so}(4,1)$ は $\mathfrak{iso}(3), \mathfrak{so}(3,1), \mathfrak{so}(4)$ 部分代数と含むことである。すなわち、異なる種類の状態を包括的に考えることができる Lie 代数となっているのである。

6.2.2 スペクトル生成演算子の Hermite 化

無次元化した動径

$$t = \alpha r,\ \alpha = \sqrt{2m_e|E|}/\hbar \tag{6.77}$$

を用いて前章の $\mathfrak{su}(1,1)$ 解法で出てきたスペクトル生成演算子

$$N_0 = \frac{1}{2}\left[-t\frac{d^2}{dt^2} - \frac{d}{dt} + \frac{\left(l+\frac{1}{2}\right)^2}{t} + t\right] \tag{6.78}$$

$$N_\pm = \frac{1}{2}\left[-t\frac{d^2}{dt^2} - \frac{d}{dt} + \frac{\left(l+\frac{1}{2}\right)^2}{t} - t \pm 2t\frac{d}{dt} \pm 1\right] \tag{6.79}$$

を三次元極座標表示に書き換えると、[*6]

$$N_0 = \frac{1}{2\alpha}\left[-r\frac{d^2}{dr^2} - \frac{d}{dr} + \frac{1}{4r} + \frac{\boldsymbol{L}^2}{\hbar^2 r} + \alpha^2 r\right] \tag{6.80}$$

$$N_\pm = \frac{1}{2\alpha}\left[-r\frac{d^2}{dr^2} - \frac{d}{dr} + \frac{1}{4r} + \frac{\boldsymbol{L}^2}{\hbar^2 r} - \alpha^2 r \pm 2\alpha r\frac{d}{dr} \pm \alpha\right] \tag{6.81}$$

$$N_1 = \frac{1}{2\alpha}\left[-r\frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{4r} + \frac{\boldsymbol{L}^2}{\hbar^2 r} - \alpha^2 r\right] \tag{6.82}$$

$$N_2 = \frac{1}{2\mathrm{i}}\left[2r\frac{\partial}{\partial r} + 1\right] \tag{6.83}$$

となる。

[*5] ただし $i, j = 1, 2, 3$

[*6] 形式的には $\boldsymbol{L}^2 = \hbar^2 l(l+1)$ とすれば良い。

ここで、

$$\tilde{N}_i := r^{-1} N_i r \tag{6.84}$$

とすると、

$$\left[\tilde{N}_1, \tilde{N}_2\right] = -\mathrm{i}\tilde{N}_0,\ \left[\tilde{N}_0, \tilde{N}_1\right] = \mathrm{i}\tilde{N}_2,\ \left[\tilde{N}_2, \tilde{N}_0\right] = \mathrm{i}\tilde{N}_1 \tag{6.85}$$

が成立し、$\tilde{N}_i$ も $\mathfrak{su}(1,1)$ を構成することがわかる。さらに、

$$D^H = \frac{1}{2}(\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{p} + \boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}) = \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\left(r\frac{\partial}{\partial r} + \frac{3}{2}\right) \tag{6.86}$$

を用いると、

$$\hbar\tilde{N}_2 = D^H \tag{6.87}$$

$$\hbar\tilde{N}_0 = \frac{1}{2\sqrt{2m_e|E|}}\left[\frac{1}{2}(r\boldsymbol{p}^2 + \boldsymbol{p}^2 r) + \frac{1}{4r}\right] + \frac{1}{2}\sqrt{2m_e|E|}r \tag{6.88}$$

$$\hbar\tilde{N}_1 = \frac{1}{2\sqrt{2m_e|E|}}\left[\frac{1}{2}(r\boldsymbol{p}^2 + \boldsymbol{p}^2 r) + \frac{1}{4r}\right] - \frac{1}{2}\sqrt{2m_e|E|}r \tag{6.89}$$

となり、Hermite 化されていることがわかる。

6.2.3　水素原子における $\mathfrak{so}(4,2)$ の共形幾何構造

ここまでで水素原子において、二つの代数構造を見てきた。一つは異なる 3 種類の状態の対称性を包含する Lie 代数 $\mathfrak{so}(4,1)$ であり、もう一つはスペクトル生成 Lie 代数 $\mathfrak{su}(1,1)$ である。前者が同じエネルギー内の状態を結びつけるのに対して、後者はエネルギーの異なる状態を結びつける働きをする。両者を統合すれば、全状態を結びつける代数を構築できることが期待される。両者の統合可能性についてはヒントがあって、それは前々節で述べた $\mathfrak{so}(4,1)$ の演算子 D^H が、前節の $\mathfrak{su}(1,1)$ の演算子 $\hbar\tilde{N}_2$ が一致することにある。

構成には本来試行錯誤が必要であるが結果を記すと、先に定義した $M_{\mu,\nu}$ $(\mu,\nu = 1,2,3,4,5)$ に加えて、

$$M_{56} := \tilde{N}_0 \tag{6.90}$$

$$M_{46} := \tilde{N}_1 \tag{6.91}$$

$$M_{i6} := \frac{1}{2\hbar} r p_i + \mathrm{h.c.} \tag{6.92}$$

$$\eta = \mathrm{diag}(1,1,1,1,-1,-1) \tag{6.93}$$

としてやると、[7]

$$[M_{\mu\nu}, M_{\rho\sigma}] = \mathrm{i}\eta_{\mu\rho}M_{\nu\sigma} - \mathrm{i}\eta_{\nu\rho}M_{\mu\sigma} - \mathrm{i}\eta_{\mu\sigma}M_{\nu\rho} + \mathrm{i}\eta_{\nu\sigma}M_{\mu\rho} \tag{6.94}$$

となり、これらが $\mathfrak{so}(4,2)$ を構成する。これは $3+1$ 次元 Minkowski 空間に対応する共形幾何学を記述する。

[7] ただし $i, j = 1, 2, 3$

第 7 章

因数分解解法と超対称性構造

本章は主に [31, 38] を参考にしている。

動径部分の固有値方程式

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

について $R_l(r)=\psi_l(r)/r$ 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

$$\left[\frac{d^2}{dr^2}-\frac{l(l+1)}{r^2}+\frac{2}{r}\frac{\kappa m_e}{\hbar^2}+2E_l\frac{m_e}{\hbar^2}\right]\psi_l(\boldsymbol{r})=0 \tag{7.1}$$

に帰着させることができる。

$$H_l(r)=-\frac{d^2}{dr^2}+\frac{l(l+1)}{r^2}-\frac{2}{r}\frac{\kappa m_e}{\hbar^2} \tag{7.2}$$

とおけば、

$$H_l(r)R_l(r)=2E_l\frac{m_e}{\hbar^2}\psi_l(r)=:\epsilon_l\psi_l(r) \tag{7.3}$$

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。

7.1　水素原子の因数分解解法

7.1.1　昇降演算子の導入

この節では、

$$H_l(r)=a_l^\dagger a_l+c_l \tag{7.4}$$

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、

$$a_l = \frac{d}{dr} + \frac{l}{r} - \frac{1}{l}\frac{\kappa m_e}{\hbar^2} \tag{7.5}$$

$$a_l^\dagger = -\frac{d}{dr} + \frac{l}{r} - \frac{1}{l}\frac{\kappa m_e}{\hbar^2} \tag{7.6}$$

$$c_l = -\frac{1}{l^2}\left(\frac{\kappa m_e}{\hbar^2}\right)^2 \tag{7.7}$$

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、

$$[a_l, a_l^\dagger] = -\frac{2l}{r^2} \tag{7.8}$$

となることから、

$$\begin{aligned} a_l a_l^\dagger &= a_l^\dagger a_l - \frac{2l}{r^2} \\ &= H_l(r) - c_l - \frac{2l}{r^2} \\ &= H_{l-1}(r) - c_l \end{aligned} \tag{7.9}$$

となり、(ただし、$l \geq 1$)

$$H_{l-1}(r) = a_l a_l^\dagger + c_l \tag{7.10}$$

が成立する。したがって、$l \geq 1$ で、

$$H_l(r) = a_{l+1}a_{l+1}^\dagger + c_{l+1} = a_l^\dagger a_l + c_l \tag{7.11}$$

となる。ただし、式 7.11 の最初の等式に付いては $l = 0$ でも成立している。

7.1.2　昇降演算子の働き

角運動量量子数 $l \geq 1$ に対応する解が

$$H_l \psi_{l,k} = \epsilon_{l,k} \psi_{l,k} \tag{7.12}$$

のように与えられたとする。

このとき、

$$\begin{aligned} H_{l+1} a_{l+1}^{\dagger} \psi_{l,k} &= \left[a_{l+1}^{\dagger} a_{l+1} + c_{l+1} \right] a_{l+1}^{\dagger} \psi_{l,k} \\ &= \left[a_{l+1}^{\dagger} (\mathcal{H}_l - c_{l+1}) + c_{l+1} a_{l+1}^{\dagger} \right] \psi_{l,k} \\ &= \epsilon_{l,k} a_{l+1}^{\dagger} \psi_{l,k} \end{aligned} \tag{7.13}$$

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、

$$\begin{aligned} H_{l-1} a_l \psi_{l,k} &= \left[a_l a_l^{\dagger} + c_l \right] a_l \psi_{l,n} \\ &= \left[a_l (H_l - c_l) + c_l a_l \right] \psi_{l,k} \\ &= \epsilon_{l,k} a_l \psi_{l,k} \end{aligned} \tag{7.14}$$

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。

7.1.3　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、

$$H_l\psi = \left[a_{l+1}a_{l+1}^{\dagger} + c_{l+1}\right]\psi = c_{l+1}\psi \tag{7.15}$$

となり、対応する固有値は

$$c_{l+1} = -\frac{1}{(l+1)^2}\left(\frac{\kappa m_e}{\hbar^2}\right)^2 \tag{7.16}$$

となる。この ψ を $\psi_{l,0}$ とすると、

$$\psi_{l,0} \propto r^{l+1}e^{-\frac{r}{l+1}\frac{\kappa m_e}{\hbar^2}} \tag{7.17}$$

がその関数形である。対応するエネルギーは、

$$E_{l,0} = -\frac{1}{2(l+1)^2}\frac{\kappa^2 m_e}{\hbar^2} \tag{7.18}$$

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

$$\sum_{m=0}^{l}(2m+1) = l(l+1) + l + 1 = (l+1)^2 \tag{7.19}$$

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。

7.2 超対称性量子力学(SUSY QM)

7.2.1 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。

$$H = \begin{pmatrix} H_1 & 0 \\ 0 & H_2 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} E & 0 \\ 0 & E \end{pmatrix} \tag{7.20}$$

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、

$$H_1 = A^\dagger A, \tag{7.21}$$
$$H_2 = AA^\dagger \tag{7.22}$$

と書けるものとする。考えている Hilbert 空間は

$$\mathcal{H}_{fb} = L^2(\mathbb{R}) \oplus L^2(\mathbb{R}) \tag{7.23}$$

というものになる。

ここで、二つの共役な演算子

$$Q = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ A & 0 \end{pmatrix}, \tag{7.24}$$
$$Q^\dagger = \begin{pmatrix} 0 & A^\dagger \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \tag{7.25}$$

を定義すると反交換ブラケット $\{\cdot,\cdot\}$[*1]を用いて、

$$\{Q, Q\} = 0 \tag{7.26}$$
$$\left\{Q^\dagger, Q^\dagger\right\} = 0 \tag{7.27}$$
$$\left\{Q, Q^\dagger\right\} = H - E \tag{7.28}$$

などが成立する。そして、

$$Q^2 = \left(Q^\dagger\right)^2 = 0 \tag{7.29}$$

である。

したがって、

$$H = \left(Q + Q^\dagger\right)^2 + E \tag{7.30}$$

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。

7.2.2　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

$$f = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \tag{7.31}$$
$$f^\dagger = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \tag{7.32}$$

[*1] 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。

を導入する。これらの間には

$$\{f, f^\dagger\} = 1 \tag{7.33}$$
$$\{f, f\} = 0 \tag{7.34}$$
$$\{f^\dagger, f^\dagger\} = 0 \tag{7.35}$$

という関係式が成立し、

$$f^2 = \left(f^\dagger\right)^2 = 0 \tag{7.36}$$

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、

$$Q = Af \tag{7.37}$$
$$Q^\dagger = A^\dagger f^\dagger \tag{7.38}$$

が成立し、先に導入した式 7.20 の超対称性ハミルトニアンは

$$H = \left(Af + A^\dagger f^\dagger\right)^2 + E \tag{7.39}$$

と書けることがわかる。

7.2.3 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 Hilbert 空間である。すなわち、

$$\mathcal{H}_f = \{c_0|0\rangle + c_1|1\rangle \mid |c_0|^2 + |c_1|^2 = 1, c_0, c_1 \in \mathbb{R}\} \tag{7.40}$$

である。ここで、

$$|0\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \tag{7.41}$$

$$|1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \tag{7.42}$$

と見なすことができる。すなわち、

$$f^\dagger|1\rangle = 0 \tag{7.43}$$
$$f^\dagger|0\rangle = |1\rangle \tag{7.44}$$
$$f^\dagger|0\rangle = 0 \tag{7.45}$$
$$f^\dagger|1\rangle = |0\rangle \tag{7.46}$$

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

$$\langle 0|f^\dagger f|0\rangle = 0 \tag{7.47}$$

$$\langle 1|f^\dagger f|1\rangle = 1 \tag{7.48}$$

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 Hilbert 空間 $\mathcal{H}_{fb}$ とフォック空間 $\mathcal{H}_f$ の関係は

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_{fb} &= L^2(\boldsymbol{R}) \otimes_{\mathbb{R}} \mathcal{H}_f \\ &= \{f|0\rangle + b|1\rangle \mid \|f\|^2 + \|b\|^2 = 1, f, b \in L^2(\mathbb{R})\}\end{aligned} \tag{7.49}$$

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。

7.2.4 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

$$\begin{aligned}H &= \left(Af + A^\dagger f^\dagger\right)^2 + E \\ &= AA^\dagger f f^\dagger + A^\dagger A f^\dagger f + E \\ &= AA^\dagger \left(1 - f^\dagger f\right) + A^\dagger A f^\dagger f + E\end{aligned} \tag{7.50}$$

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、

$$|b\rangle = b(x)|0\rangle \tag{7.51}$$

と表されてエネルギーが ϵ_b とする。ここで

$$|f\rangle = A^\dagger f^\dagger |b\rangle = A^\dagger b(x)|1\rangle \tag{7.52}$$

とすると、

$$
\begin{aligned}
H|f\rangle &= (A^\dagger A f^\dagger f + E)A^\dagger f^\dagger b(x)|0\rangle \\
&= A^\dagger f^\dagger (AA^\dagger f f^\dagger + E) b(x)|0\rangle \\
&= A^\dagger f^\dagger (A^\dagger A f^\dagger f + AA^\dagger f f^\dagger + E) b(x)|0\rangle \\
&= A^\dagger f^\dagger H|b\rangle \\
&= \epsilon_b |f\rangle
\end{aligned} \tag{7.53}
$$

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、

$$
\langle \psi \mid H \mid \psi \rangle = \|A^\dagger f^\dagger |\psi\rangle\|^2 + \|Af|\psi\rangle\|^2 + E \geq E \tag{7.54}
$$

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

$$
\begin{aligned}
\langle f|f\rangle &= \langle b|AA^\dagger f f^\dagger |b\rangle \\
&= \langle b|H - E|b\rangle \\
&= \epsilon_b - E
\end{aligned} \tag{7.55}
$$

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

$$
\epsilon_b > E \tag{7.56}
$$

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、

$$
Af_0 = 0 \tag{7.57}
$$

後者が解であれば、

$$
A^\dagger b_0 = 0 \tag{7.58}
$$

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

$$\Delta = n_b - n_f \tag{7.59}$$

定義したとき、これは Witten 指数と呼ばれる量となる。

7.3 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 7.2 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、

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_l(r) &= \begin{pmatrix} H_l(r) & 0 \\ 0 & H_{l-1}(r) \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} a_l^\dagger a_l & 0 \\ 0 & a_l a_l^\dagger \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} c_l & 0 \\ 0 & c_l \end{pmatrix} \end{aligned} \tag{7.60}$$

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、最低エネルギー状態に超対称性ペア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

$$\Delta = 1 \tag{7.61}$$

となる。

第 8 章

最後に

本講義では水素原子の数理に関わるもののうち、主にリー群・リー代数が関わるところについて紹介した。講義を通して、水素原子には面白い対称性が潜んでいるおり、単に手で解くことができる系ではないことを実感できたとすれば大変幸いなことである。

本講義で紹介した事項についてさらに理解を深めたいという方のために教科書をいくつか挙げる。LRL ベクトルについては色々な量子力学や古典力学の教科書で出てくるが、読みやすい記事としては [32] を挙げる。リー群・リー代数については [43, 44, 45, 46, 47] などがある。物理における対称性については [33, 38, 39] などがある。この中で [38] については超対称性量子力学に関する章がある。因数分解解法については [40] が詳しい。力学的対称性の話題については [33, 34] が詳しい。[33] は水素原子や Maxwell 方程式における力学的対称性について詳しく、[34] は固体物理における力学的対称性について詳しい。水素原子の数理について詳しい本はいくつかあるが、その中でも [35] は様々な数理物理手法を駆使して書かれたものでありお勧めしたい。水素原子の数理に関する古いレビュー [36, 37] もお勧めしたい。共形変換については [42, 41, 35] の一部で扱われている。

実際には水素原子の数理にはこの講義で触れていない話題が沢山あり、今でも盛んというほどではないが少数の研究者によって探求が進められている。また、分子や固体物理など他の系へ水素原子の数理を応用する研究も進められている。そうした発展的話題について関心を持った方が出てくるとさらに幸いである。

参考文献

[1] J.J. Balmer (1885), "Notiz über die Spectrallinien des Wasserstoffs" [Note on the spectral lines of hydrogen]. Annalen der Physik und Chemie. 3rd series (in German). 25: 80–87.

[2] J.R. Rydberg (1889), "Researches sur la constitution des spectres d'émission des éléments chimiques." Kongliga Svenska Vetenskaps-Akademiens Handlingar. 23 (11): 1–177; J.R. Rydberg (1890), "On the structure of the line-spectra of the chemical elements". Phil. Mag. 5th series. 29: 331–337. N. Bohr (1985), "Rydberg's discovery of the spectral laws". In Kalckar, J. (ed.). Collected works. 10. Amsterdam: North-Holland Publ. Cy. pp. 373–379.

[3] T. Lyman (1906), "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): 125–146; T. Lyman (1914), "An Extension of the Spectrum in the Extreme Ultra-Violet" , Nature 93: 241; F/ Paschen (1908), "Zur Kenntnis ultraroter Linienspektra. I. (Normalwellenlängen bis 27000 Å.-E.)" , Ann. Phys., 332 (13): 537–570; F. S. Frederick (1922), "Visible and infra-red radiation of hydrogen" , Astrophysical Journal 56; A. H. Pfund (1924), "The emission of nitrogen and hydrogen in infrared" , J. Opt. Soc. Am. 9 (3): 193–196; C. J. Humphreys (1953), "Humphreys Series" , J. Research Natl. Bur. Standards 50.

[4] N. Bohr (1913), "On the Constitution of Atoms and Molecules" . Phil. Mag. 6th Series 26 (151): 1–25; N. Bohr (1913), "On the Constitution of Atoms and Molecules, Part II, Systems Containing Only a Single Nucleus" Phil. Mag. 6th Series 26: 476–502; N. Bohr (1913), "On the Constitution of Atoms and Molecules, Part III, Systems containing several nuclei" . Phil. Mag. 6th Series 26: 857–875.

[5] A. Sommerfeld (1916), "Zur Quantentheorie der Spektrallinien" . Ann. Phys. 356

(17): 1–94.

[6] E. Schrödinger (1926), "Quantisierung als Eigenwertproblem (Erste Mitteilung)." Ann. Phys. (4), 79, 361–376; E. Schrödinger (1926), "Quantisierung als Eigenwertproblem (Zweite Mitteilung)." Ann. Phys. (4), 79, 489–527; E. Schrödinger (1926), "Quantisierung als Eigenwertproblem (Dritte Mitteilung: Storungstheorie, mit Anwendung auf den Starkeffekt der Balmerlinien)." Ann. Phys. (4), 80, 437–490; E. Schrödinger (1926), "Quantisierung als Eigenwertproblem (Vierte Mitteilung)." Ann. Phys. (4), 81, 109–139.

[7] W. Heisenberg (1925), "Über quantentheoretische Umdeutung kinematischer und mechanischer Beziehungen." Z. Physik. 33: 879–893; M. Born, P. Jordan (1925), "Zur Quantenmechanik." Z. Physik. 34: 858–888; M. Born, W. Heisenberg, P. Jordan (1926), "Zur Quantenmechanik II." Z. Physik. 35: 557–615.

[8] E. Schrödinger (1926), "Über das Verhältnis der Heisenberg-Born-Jordanschen Quantenmechanik zu der meinen." Ann. Phys. (4), 79, 734–756.

[9] J. Bertrand (1873), "Théorème relatif au mouvement d'un point attiré vers un centre fixe." C. R. Acad. Sci. 77, 849.

[10] F. C Santos, V. Soares, A. C. Tort (2007), "An English translation of Bertrand's theorem". arXiv:0704.2396.

[11] Miller Jr, Willard, Sarah Post, and Pavel Winternitz (2013), "Classical and quantum superintegrability with applications." J. Phys. A: Math. Theor. 46, 42423001.

[12] J. M. Jauch, E. L. Hill (1940), "On the problem of degeneracy in quantum mechanics." Phys. Rev. 57, 641.

[13] D. M. Fradkin (1965), "Three-dimensional isotropic harmonic oscillator and SU 3." Am. J. Phys. 33, 207.

[14] J. Hermann (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.

[15] J. Bernoulli (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.

[16] P. S. Laplace (1799), "Traité de mécanique celeste. Tome I, Premiere Partie, Livre II." pp.165ff.

[17] W. Lenz (1924), "Über den Bewegungsverlauf und die Quantenzustände der gestörten Keplerbewegung." Z. Physik. 24,: 197.
[18] J. W. Gibbs, E. B. Wilson (1901), "Vector Analysis." New York: Scribners. p. 135.
[19] C. Runge, (1919), "Vektoranalysis." Leipzig, Hirzel. Volume I.
[20] W. Pauli (1926), "Über das Wasserstoffspektrum vom Standpunkt der neuen Quantenmechanik." Z. Physik. 36, 336.
[21] V. Fock (1935), "Zur Theorie des Wasserstoffatoms." Z. Physick. 98, 145.
[22] V. Bargmann (1936), "Zur theorie des Wasserstoffatoms." Z. Physik. 99, 576.
[23] M. Novaes (2004), "Some basics of su(1,1)." Revista Brasileira de Ensino de Fisica, 26(4), 351–357.
[24] G. Lindblad, B. Nagel "Continuous bases for unitary irreducible representations of SU(1,1)."
[25] P. M. Dirac (1935), "The principles of Quantum Mechanics." New York, Oxford.
[26] E. Schrödinger, Proc. Roy. Irish Acad. 46 A, 9 (1940); Proc. Roy. Irish Acad. 46 A, 183 (1941); Proc. Roy. Irish Acad. 47 A, 53 (1941).
[27] L. Infeld, T. E. Hull (1951), "The factorization method." Rev. Mod. Phys. 23, 21.
[28] E. Witten (1981), "Dynamical Breaking of Supersymmetry." Nucl. Phys. B 188, 513.
[29] F. Cooper, A. Khare, U. Sukhatme (1995), "Supersymmetry and quantum mechanics." Phys. Rep. 251, 267.
[30] H. Katsura, H. Aoki (2006), "Exact supersymmetry in the relativistic hydrogen atom in general dimensions – supercharge and the generalized Johnson–Lippmann operator." J. Math. Phys. 47, 032301
[31] J. O. ROSAS-ORTIZ (1998), "On the factorization method in quantum mechanics." arXiv preprint quant-ph/9812003.
[32] 国場敦夫（2007）「ラプラス–ルンゲ–レンツベクトル」数理科学 45(7), 50–55, サイエンス社.
[33] C. E. Wulfman (2010) "Dynamical Symmetry." World Scientific.
[34] K. Kikoin, M. Kiselev, Y. Avisha (2012), "Dynamical Symmetries for Nanostructures." Springer.
[35] B. Cordani (2002), "The Kepler Problem" Birkhaeuser.

[36] M. Bander, C. Itzykson (1966), “Group theory and the hydrogen atom (I).” Reviews of modern Physics 38 330.

[37] M. Bander, C. Itzykson (1966), “Group theory and the hydrogen atom (II).” Reviews of modern Physics 38 346.

[38] 新井朝雄（2008）「物理の中の対称性」日本評論社.

[39] 井ノ口順一（2010）「リッカチのひ・み・つ」日本評論社.

[40] 佐々木隆（2016）「可解な量子力学系の数理物理」サイエンス社.

[41] 高崎金久（2005）「ツイスターの世界」共立出版.

[42] 金谷健一（2014）「幾何学と代数系」森北出版.

[43] 伊勢幹夫（1977）「岩波講座・基礎数学・Lie 群 I」岩波書店.

[44] 島和久（1981）「連続群とその表現論」岩波書店.

[45] 井ノ口順一（2018）「はじめてのリー環」現代数学社.

[46] 井ノ口順一（2017）「はじめてのリー群」現代数学社.

[47] R. Gilmore (1974), “Lie groups, Lie algebras, and some of their applications.” New York, Wiley.