Quamtum Mechanics

Toshiya Tanaka

2021 年 11 月 10 日

1　1 次元量子系

1.1　自由粒子

一次元自由粒子の Schrödinger 方程式は

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\psi(x) = E\psi(x) \tag{1.1}$$

である．変形して，

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\psi(x) = -k^2\psi(x) \quad ; \quad k := \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} > 0 \tag{1.2}$$

である．この一般解は任意定数 $C_1, C_2 \in \mathbb{C}$ または $A \in \mathbb{C}, \delta \in \mathbb{R}$ を用いて

$$\psi(x) = C_1 e^{ikx} + C_2 e^{-ikx} = A\sin(kx+\delta) \tag{1.3}$$

と書ける．[i.]

これは，無限に高い井戸型ポテンシャル

$$V(x) = \begin{cases} 0 & (0 \le x \le L) \\ \infty & (x \le 0,\ L \le x) \end{cases} \tag{1.4}$$

で規格化したのち，井戸の幅を無限大にするというのが一つの方法である．[ii.] この方法を用いるとき，ナイーブな差異として境界条件の取り方があるが，意外と面白いので紹介する．

Dirichlet 型境界条件

まず，一番簡単なのは「境界で波動関数がゼロ」i.e.,$\psi(0) = \psi(L) = 0$ とすることである．これを Dirichlet 型境界条件[iii.]という．このとき，Eq(1.3) の sine の解を採用すると簡単で，

$$A\sin\delta = A\sin(kL+\delta) = 0 \tag{1.5}$$

なので，$\delta = 0,\ kL = n\pi\ (n \in \mathbb{Z}_{>0})$ となる．一つの固有状態を規格化しておくと，

$$\int_0^L \mathrm{d}x |A|^2 \sin^2(kx) = 1 \tag{1.6}$$

i. 以前 https://www.mns.kyutech.ac.jp/~okamoto/education/quantum/quantum-1dim100802.pdf を参照して，自由粒子では重ね合わせの状態は取らないなど議論していたが，それは誤りであると栗本先生から指摘を受けた．私が誤っていた点は，演算子が可換ならば同時固有状態を取ることが出来るが，すべての状態が同時固有状態なわけでないということ．固有状態の線形結合は一般に固有状態でないからそれは当たり前．

ii. もう一つ，Dirac delta を使う規格化がある．

iii. これは PDE の言葉だろうか？例えば Laplacian は Hermitian であってほしいわけだが，そうであるためには表面項が消える必要があって，その時に Derichlet を入れたりする．他に，微分が境界で消える Neumann であったりこの後の PBC も表面項を消す境界条件になっていたりする．

の条件から，$|A| = \sqrt{2/L}$ と決まり，固有関数は

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) \quad ; \quad n \in \mathbb{Z}_{>0} \tag{1.7}$$

となる．

ところで，これは何の固有状態であるかというと，エネルギーの固有状態である．エネルギー,i.e., Hamiltonian, の構成上，これは運動量の固有状態になっていてほしいが，そうはなっていない．[iv.] 実際，

$$-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) = -i\hbar\sqrt{\frac{2}{L}}\frac{n\pi}{L} \cos\left(\frac{n\pi}{L}x\right) \tag{1.8}$$

と sine が cosine になっており，固有関数でない．Hamiltonian では二回微分することで sine が sine に戻っていた．

2 状態 ψ, ϕ を考えると，

$$(\phi, P\psi) = \int_0^L \mathrm{d}x\phi^*(x)\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)f(x) \tag{1.9}$$

$$= \left[\frac{\partial}{\partial x}\phi^*(x)\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\psi(x)\right]_0^L + \int_0^L \mathrm{d}x\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\phi(x)\right)^*\psi(x) \tag{1.10}$$

$$= (P\phi, \psi) \tag{1.11}$$

となる．これは，運動量は Hermitian ということ．ところが，P と $P^\dagger$[v.] の定義域を見てみると，$\mathrm{dom}P = \{\psi\colon \mathbb{R} \to \mathbb{C} \mid \psi(0) = \psi(L) = 0\}$ なのに対し，$\mathrm{dom}P^\dagger = \{\phi\colon \mathbb{R} \to \mathbb{C} \mid$ 特に制限なし $\}$ である．[vi.]

すなわち Dirichlet 境界条件の下で運動量演算子が Hermitian だが self adjoint でない[vii.] ということである．[viii.]

周期的境界条件

別の境界条件の取り方として，周期的境界条件 (Periodic boundary condition; PBC)$\psi(x) = \psi(x+L)$ がある．Eq(1.3) で exponential のほうを使うと $kL = 2n\pi (n \in \mathbb{Z}_{\geq 0})$ となる．先ほどと違い等号がつくのは，exponential では引数が 0 でも null state にならないから．また，ground state 以外では縮退していて，固有状態を全て別々に扱うことにすると，負の整数も許して勘定することが出来る．すなわち固有状態 $\langle \ldots, e^{2i\pi x/L\cdot(-1)}, 1, e^{2i\pi x/L\cdot 1}, \ldots \rangle$ たちが全状態空間を張るということ．具体的な規格化などは次にやる．

この境界条件の下では上に列挙したエネルギー固有状態たちは運動量の同次固有状態になり，運動量はちゃんと self adjoint である．

Twisted boundary condition

もう少し変な境界条件の取り方もできて，量子力学の基本的要請から phase の違いは同一視できるので「一周して同じ状態」という境界条件を PBC より一般に $\psi(x+L) = e^{i\theta}\psi(x)$ といれることが出来る．これを twisted boundary condition という．

境界条件より，

$$kL = \theta + 2\pi n \quad n \in \mathbb{Z} \tag{1.12}$$

となる.，正負をまとめることで k および n は負の値も取ることに注意.

k の定義から，エネルギー固有値は

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2mL^2}(\theta + 2\pi n)^2 \tag{1.13}$$

---

iv. このことは谷村先生に 2021 年 03 月 02 日の集中講義で質問し答えていただいた．

v. 関数 f, g と演算子 A があって，内積を $(f, Ag) = (Bf, g)$ とする演算子 B をもって $A^\dagger \coloneqq B$ と定め，A の Hermitian conjugate という．

vi. これは部分積分した第一項を見れば，ψ の条件で表面項が消えてくれるので ϕ に制限を書ける必要がないことが分かる．

vii. 最近 https://arxiv.org/abs/quant-ph/0103153 が話題になっていた気がする．

viii. Hermitian とは $P = P^\dagger$ のことで, self adjoint はそれに加え両者の定義域が一致していることまで要求する．self adjoint operator は Hermitian operator より狭いクラスということ．self adjoint $\subset$ Hermitian みたいな感じ．物理量は self adjoint のクラス．

となり，固有状態は

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} \exp\left(i \frac{\theta + 2\pi n}{L} x \right) \tag{1.14}$$

となる．

ここで，

- $\theta = 0$ のとき，i.e., 通常の PBC のとき，

$$E_n = \frac{2\pi^2 \hbar^2}{mL^2} n^2 \tag{1.15}$$

  となる．spectrum は $n \neq 0$ のとき正負の組で二重に縮退するが，ground state は縮退しない．
- $\theta = \pi$ のとき，

$$E_n = \frac{2\pi^2 \hbar^2}{mL^2} \left(n + \frac{1}{2} \right)^2 \tag{1.16}$$

  で，すべての $n \in \mathbb{Z}$ において縮退する．
- $\theta \neq 0, \pi$ のとき，すべての $n \in \mathbb{Z}$ において縮退しない．

さて，θ の制限を外して，$\theta : 0 \to 2\pi$ に連続的に（断熱的に）動かすことを考える．すると，$|n\rangle$ だった状態が $\theta = 2\pi$ をまたいだ瞬間 $|n+1\rangle$ に移ってしまう．[ix.] これは spectral flow と呼ばれるらしく，非常に面白い．

[ix.] これは境界を同一視した，i.e., 一次元円周 S^1 の topology を持たせた，ことで空間が単連結でなくなったことによるらしい．