

問題 1 量子力学: 周期境界条件・デルタ関数ポテンシャル・摂動論

1-1

$[S_x, S_y]$ は

$$[S_x, S_y] = \frac{\hbar^2}{4} \left[\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \right] = i\hbar \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = i\hbar S_z \quad (1-1.1)$$

$[H, S_z]$ は

$$[H, S_z] = \left[\frac{p_x^2 + p_y^2}{2m} I_{2 \times 2} + \frac{\hbar e B_z(x, y)}{2m} \sigma_z, \frac{\hbar}{2} \sigma_z \right] = 0 \quad (1-1.2)$$

1-2

$$\begin{aligned} D &= \begin{pmatrix} 0 & p_x - ip_y \\ p_x + ip_y & 0 \end{pmatrix} \\ D\sigma_z &= \begin{pmatrix} 0 & -p_x + ip_y \\ p_x + ip_y & 0 \end{pmatrix} \\ \sigma_z D &= \begin{pmatrix} 0 & p_x - ip_y \\ -p_x - ip_y & 0 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (1-2.1)$$

より $D\sigma_z = -\sigma_z D$ がわかる。また

$$\begin{aligned} D^2 &= \begin{pmatrix} 0 & p_x - ip_y \\ p_x + ip_y & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & p_x - ip_y \\ p_x + ip_y & 0 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} p_x^2 + p_y^2 + \hbar e(\partial_x A_y - \partial_y A_x) & 0 \\ 0 & p_x^2 + p_y^2 - \hbar e(\partial_x A_y - \partial_y A_x) \end{pmatrix} \\ \frac{D^2}{2m} &= \frac{p_x^2 + p_y^2}{2m} I_{2 \times 2} + \frac{\hbar e B_z(x, y)}{2m} \sigma_z = H \end{aligned} \quad (1-2.2)$$

よりハミルトニアン H を D で表すことができた。

1-3

$$\langle \Phi_n | \Phi_n \rangle = \langle \Psi_n | D^\dagger D | \Psi_n \rangle = \langle \Psi_n | 2mH | \Psi_n \rangle = 2mE_n \langle \Psi_n | \Psi_n \rangle \quad (1-3.1)$$

1-4

$\langle \Phi_n | \Phi_n \rangle > 0, \langle \Psi_n | \Psi_n \rangle > 0$ と (10) 式より

$$E_n = \frac{\langle \Phi_n | \Phi_n \rangle}{2m \langle \Psi_n | \Psi_n \rangle} > 0 \quad (1-4.1)$$

また、

$$\begin{aligned} H | \Phi_n \rangle &= HD | \Psi_n \rangle = DH | \Psi_n \rangle = DE_n | \Psi_n \rangle \\ &= E_n | \Phi_n \rangle \end{aligned} \quad (1-4.2)$$

より $| \Phi_n \rangle$ は $| \Psi_n \rangle$ とおなじ固有エネルギーを持つ。

そして (3) のハミルトニアンはすでに対角化されて、 $| \Psi_n \rangle$ は σ_z の固有値が $+1$ の状態であることから

$$| \Psi_n \rangle = \begin{pmatrix} | \psi_n \rangle \\ 0 \end{pmatrix} \quad (1-4.3)$$

と書けるのがわかる。これより

$$| \Phi_n \rangle = \begin{pmatrix} 0 & p_x - ip_y \\ p_x + ip_y & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} | \psi_n \rangle \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ (p_x + ip_y) | \psi_n \rangle \end{pmatrix} \quad (1-4.4)$$

となる。つまり $| \Phi_n \rangle$ は σ_z の固有値が -1 の状態である。(8) 式の交換関係を使っても示せる。

1-5

$$|D|\Psi\rangle|^2 = \langle\Psi|D^\dagger D|\Psi\rangle = 2mE\langle\Psi|\Psi\rangle = 0 \quad (1-5.1)$$

より $|D|\Psi\rangle| = 0$ である。ノルムの性質より

$$D|\Psi\rangle = 0 \quad (1-5.2)$$

そしてこの式を与えられた波動関数とベクトルポテンシャルを代入して展開していくと、

$$\begin{aligned} 0 &= \begin{pmatrix} 0 & p_x - ip_y \\ p_x + ip_y & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_\uparrow(x, y) \\ \psi_\downarrow(x, y) \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} [-i\hbar(\partial_x - i\partial_y) - ie(\partial_x - i\partial_y)\rho(x, y)]f_\downarrow(x, y) \exp\left[-\frac{e}{\hbar}\rho(x, y)\right] \\ [-i\hbar(\partial_x + i\partial_y) - ie(\partial_x + i\partial_y)\rho(x, y)]f_\uparrow(x, y) \exp\left[\frac{e}{\hbar}\rho(x, y)\right] \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \partial_w f_\downarrow(w, \bar{w}) \\ \partial_{\bar{w}} f_\uparrow(w, \bar{w}) \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (1-5.3)$$

これより f_\downarrow は \bar{w} のみなる関数、 f_\uparrow は w からなる関数とわかる。言い換えると f_\downarrow は \bar{w} の正則関数、 f_\uparrow は w の正則関数である。

1-6

$r \rightarrow \infty$ のときには

$$\rho(x, y) = \frac{bR^2}{2} \left(\frac{1}{2} + \ln \frac{r}{R} \right) \sim \frac{bR^2}{4} \quad (1-6.1)$$

となるため、スピン上向きの波動関数にある $\exp(e\rho/\hbar)$ が発散する。 f_\uparrow は有限次多項式なのでこの発散は抑えられず、 ψ_\uparrow は無限遠での存在確率が大きくなる不合理な解となるため上向きでは存在しない。

また、 $R \rightarrow \infty$ で ψ_\downarrow は f_\downarrow の多項式の次数を n とすると

$$\psi_\downarrow(x, y) = A\bar{w}^n \left(\frac{r}{R} \right)^{ebR^2/2\hbar} \exp\left(-\frac{ebR^2}{4\hbar} \right) \quad (1-6.2)$$

これより $n < ebR^2/2\hbar$ である必要があるので、最大の多項式の次数は $\lceil ebR^2/2\hbar \rceil$ である。多項式の係数の分の自由度があるので独立な状態は

$$\left\lceil \frac{ebR^2}{2\hbar} \right\rceil = \left\lceil \frac{b\pi R^2}{2\pi\hbar/e} \right\rceil \quad (1-6.3)$$

となる。つまり 2 次元平面を貫く磁束を磁束量子で割った数になる。これが Atiyah-Singer の指数定理の具体例になっている。

感想

論文を元ネタにした問題で楽しかった。論文曰くとても単純に解けて、2 次元ユークリッド Dirac 方程式に Atiyah-Singer の指数定理を適用した例になっているそうである。これはだいぶ先駆的な論文で最近だと "Topologically Protected Flatness in Chiral Moiré Heterostructures" Phys.Rev.X 15,021056 で引かれてたりする。トポロジカルフラットバンドと Atiyah-Singer の指数定理って関係あるそうだ。