

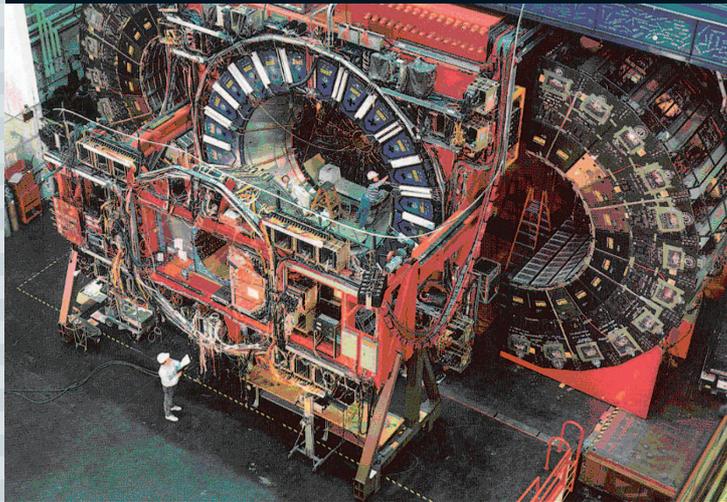
- 大質量星・連星形成の理解に向けて
- CDF実験30年の軌跡と物理成果

NO.

6

2017 | VOL. 72

B U T S U R I
日本物理学会誌



巻頭言 Preface

物理学会の男女共同参画活動と今後の方向性
The Future Plan of Gender Equality Promotion in JPS

板倉明子 …… 383
Akiko N. Itakura

現代物理のキーワード Trends

大質量星・連星形成の理解に向けて (Keyword: 大質量星形成)
Formation of Massive Stars and Binaries

富田賢吾 …… 386
Kengo Tomida

解説 Reviews

CDF 実験 30 年の軌跡と物理成果
Physics Results from the Thirty Years of the CDF Experiment

金 信弘, 受川史彦 …… 388
Shinhong Kim and Fumihiko Ukegawa

最近の研究から Researches

次世代重力波観測によるブラックホール連星の起源の検証
Probing for the Origin of Binary Black Holes with Next-Generation Gravitational-Wave Observations

西澤篤志 …… 398
Atsushi Nishizawa

多端子系のジョセフソン接合が示すトポロジカル物性
Topological Property of Multi-Terminal Josephson Junction

横山知大 …… 402
Tomohiro Yokoyama

量子力学における「時間の矢」*
Arrow of Time in Quantum Mechanics

羽田野直道 …… 408
Naomichi Hatano

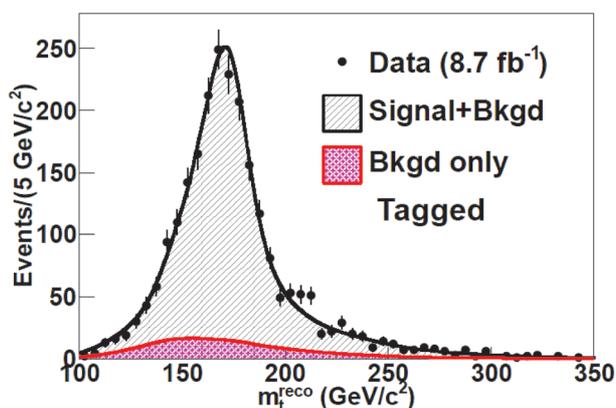
金属フタロシアニン系伝導体における分子設計と巨大磁気抵抗効果
The Study on the Giant Magnetoresistance Effect Controlled by Molecular Design of Metallophthalocyanine Derivatives

松田真生, 花咲徳亮 …… 415
Masaki Matsuda and Noriaki Hanasaki

物理教育は今 Physics Education

このままで良いのか大学の電磁気学教育
Reconsideration of University Education of Electromagnetism

小宮山 進, 竹川 敦 …… 422
Susumu Komiyama and Atsushi Takekawa



解説 (CDF 実験 30 年の軌跡と物理成果)

図は CDF 実験で測定されたトップクォークの質量分布である。RUN2 で得られたデータのうちの 8.7 fb^{-1} を用い、トップクォークの質量を 172.85 ± 0.52 (統計) ± 0.99 (系統) GeV/c^2 と求めた。これは他の実験全てを合わせた解析よりも高い精度での測定であった。詳細は本号「解説」記事を参照のこと。

* 本会 HP の会員専用ページにおいてサプレンタルマテリアルを掲載しています。

量子力学における「時間の矢」

羽田野直道 (東京大学生産技術研究所 hatano@iis.u-tokyo.ac.jp)

我々は日々「時の流れ」の中で生きています。命あるものもいつかは死に、形あるものもいつかは壊れます。日々の生活の中でこれは当然のことですが、物理学にとっては古くからの大問題であり、「時間の矢」と呼ばれています。厳密に言うと時間の矢とは、時間が正の向きに進むに従って、ある特定の現象(例えば物が壊れること)の方が、その時間反転の現象(物が形作られること)よりも頻繁に起こることを指します。ビデオを見て、それが順回しか、それとも逆回しかがわかる場合、そのビデオに映っている状況には時間の矢が存在しています。

なぜこれが物理学にとって大問題であるかという点、「弱い相互作用」を除く3つの相互作用が時間反転対称性を持っているからです。微視的なレベルで運動を記述する方程式のほとんどは、ニュートンの運動方程式、マクスウェル方程式、シュレーディンガー方程式を含めて時間反転対称な微分方程式です。したがって、それら微分方程式の解も時間反転対称であるのが当然のように思われます。実際に、理想的な調和振動子のビデオ映像は順回しか、それとも逆回しかを答えられないでしょう。しかし現実には時間反転対称性を破る現象があふれています。それを物理学はどのように説明すればよいのでしょうか。

本稿では特に微視的な量子力学に話を絞って、時間の矢が現れる仕組みを明らかにします。例えば輻射場中の二準位原子を考えましょう。励起状態にある二準位原子は光子を放出して次第に基底状態へ崩壊すると考えるのが自然です。それが実験でも観測されるところです。理論的には通常は「アインシュタイン係数」を使って議論されますが、そこでも基底状態への崩壊が結論されます。しかし、この現象は明らか

に時間の矢を持っています。もとの量子電磁力学(QED)は時間反転対称な学問体系なのに、なぜこういうことが起こるのでしょうか。

我々はこの問題を2段階に分けて解き明かします。まず第1段階で、無限体積中のシュレーディンガー方程式には、時間反転対称性を破る解が存在することを示します。元の方程式の時間反転対称性を反映して、そのような解は必ず互いに時間反転対称な、「崩壊状態」と「成長状態」のペアで現れます。(歴史的には、これらは「共鳴状態」・「反共鳴状態」と呼ばれてきました。)

実は、ここまではこれまでも多くの議論があります。しかし時間の矢が現れることを説明するためには、なぜ崩壊状態が卓越して選ばれるのかまで示す必要があります。これが、これまでの議論で欠けていた点でした。それに対して我々は、数学的に厳密な議論を経て以下のことを示しました。初期条件問題、つまり「ある状態が初期条件として与えられたときに、その後、何が起こるかを問う問題」の場合には自動的に崩壊状態が選択され、逆に終末条件問題、つまり「ある状態が終末条件として与えられたときに、その前に、何が起こったかを問う問題」の場合には自動的に成長する解が選択されるのです。(これは、遅延グリーン関数と先進グリーン関数を定義するときに付与する微少量の符号を論理的に説明したことになっています。)輻射場中の二準位原子の問題は初期条件問題なので、崩壊状態が卓越して選択されます。

ただし、通常の二準位原子の議論では全時刻で純粋な指数関数的減衰しか得られません。それに対して我々の議論では短時間領域で指数関数的減衰ではなく、徐々に成長状態から崩壊状態に切り替わる様子も確認できました。

—Keywords—

開放量子系：

興味ある量子系を中央に据え、それが無限自由度の外界と結合しているとき、その全体を開放量子系と呼びます。量子散乱問題は最も簡単な開放量子系です。量子系が熱浴と結合している場合も開放量子系であり、最近の非平衡統計物理学の進展の中で盛んに研究されています。開放量子系のハミルトニアンは一般に非エルミートで、離散固有状態として共鳴状態を持ちます。

非エルミート性：

通常はエルミートとされるハミルトニアンも、ヒルベルト空間(通常の規格化ができる関数空間)の外の関数に対しては非エルミート演算子として振る舞うことがあります。実際に共鳴状態に対してはハミルトニアンは非エルミートになり、複素固有値を持ちます。開放量子系には規格化できない関数も存在できるので、開放量子系を表す有効ハミルトニアンとして、非エルミートなハミルトニアンの研究が盛んになりつつあります。

共鳴状態：

多くの場合、散乱問題のS行列の極として定義されますが、ハミルトニアンの特殊な境界条件下での固有状態としても定義できます。ハミルトニアンの持つ時間反転対称性を破る解であり、崩壊現象を記述するので、本文では崩壊状態と呼んでいます。時間反転な解である反共鳴状態(本文では成長状態と呼びます)とペアで、ヒルベルト空間の外に規格化できない固有関数として現れます。

本記事の長さは通常の「最近の研究から」記事の規定を超過しておりますが、編集委員会の判断によりこのまま掲載しています。

1. 「時間の矢」とは

本稿では我々（共同研究者 Gonzalo Ordóñez 氏と私）の最近の研究^{1,2)}に基づき、微視的な量子力学に話を絞って、時間の矢が現れる仕組みを明らかにします。上述の輻射場中の二準位原子の崩壊に対する「アインシュタイン係数」は以下のような議論です（例えば文献3, 4を参照）。 N 個の光子のある輻射場中の励起原子が光子を1個放出して励起状態から基底状態に落ちる「誘導放出」の確率は、 $N+1$ 個の光子の輻射場から原子が光子を1個吸収して励起される確率とちょうど等しく、真空中に光子を放出して基底状態に落ちる「自然放出」の分だけ放出確率が吸収確率よりも大きいので、全体として基底状態に落ちてゆくことになり、時間反転対称性が破れています。

この議論で時間反転対称性が破れるのは、ユニタリー時間発展 $\exp(-iHt)$ を近似してユニタリー性を破っているからです。最も簡単な議論ではフェルミの黄金律の計算のために $\exp(-iHt)$ を摂動展開します。Wigner-Weisskopfの方法ではマルコフ近似を使うことでユニタリー性を破ります。他にも時間反転対称性の破れを知らぬ間に導入してしまっている理論を時折見かけます。しかし、現実に観測される時間の矢が近似のために引き起こされるという説明は納得できるものではなく、時間の矢の説明は他に求める必要があります。

本稿の問題をより明確にするために、ここで時間の矢を分類しておきましょう（例えば文献5, 6を参照）。まず「**力学的時間の矢**」は、微視的な運動方程式の記述する現象が時間の矢を持つ問題です。理想的な調和振動子のビデオ映像は順回しか、それとも逆回しかを答えられませんが、現実の力学的振動子ではやがて振幅が減衰するので、順回しか逆回しかが答えられます。これは、振動子の力学的エネルギーが周囲の自由度に散逸するからです。このことから、力学的時間の矢は無数の自由度が関わる問題であることが見て取れます。本稿の問題も力学的時間の矢に属します。

その他に有名な時間の矢として「**熱力学的時間の矢**」があります。これは熱力学第2法則が時間反転対称性を破っている問題です。熱力学は主に巨視的な系を扱うため、力学的時間の矢と区別して考えた方がよいでしょう。時間の矢は「粗視化」が原因であるという説がありますが、⁷⁾ これは熱力学的時間の矢にだけ当てはめられる説明です。

「**宇宙論的時間の矢**」は、宇宙が今まさに膨張していることを指します。もし遠い未来に宇宙が収縮に転じたとして、原子は励起し始めるのか、エントロピーは減少し始めるのか、といった疑問に確信を持って答えられる人はいないのではないでしょうか。

「**心理学的時間の矢**」は、我々が過去を記憶しているのに未来は記憶していないことを指します。これが我々の「時の流れ」の感覚を生んでいると思われれます。一見、物理学の対象ではないようですが、我々の脳はエントロピー増大則を利用して記憶しているという説もあり、将来的に

は物理学の興味深い対象であると思います。

この節の最後に、より根源的な問題に触れておきます。リードページでも述べたように、時間の矢の問題においては、あくまで時間は正の向きに進むことを前提としています。本稿でも、時間の正の向きは決まっているとして、あくまでその中で起こる物理現象を議論します。それでは、そもそも時間の正の向きは何で決まるのでしょうか。これは、さらに大きな問題として考えられるべきであり、本稿の範囲を超えますので、これ以上は述べません。

2. 「対称性の破れ」と「時間の矢」

以上はいずれも興味深い問題ですが、本稿では最初の「**力学的時間の矢**」の中でも特にシュレーディンガー方程式に限定して話を進めます。シュレーディンガー方程式は時間反転対称な微分方程式なのに、なぜ輻射場中の原子はいつも基底状態に崩壊するのかという問題です。

ここで時間の矢の問題には、単なる時間反転対称性の破れの問題に加えて、対称性の破れた状態がどのように選択されるかという別の問題が含まれていることを強調しておきましょう。そこでまず、イジング模型における自発的対称性の破れを復習します。全スピンを同時に反転する操作に対してイジング模型のハミルトニアンは対称ですが、2次元以上の無限に大きな強磁性イジング模型では相転移が起こり、低温相では自発的に対称性が破れます。多数のスピンの上を向いている状態と下を向いている状態の2つの解が現れ、無限系ではそれらは互いに有限ステップで行き来できません。現実には、どちらか一方の解が偶然に選ばれます。

以下で第一に示すのも、無限に大きな系では、時間反転対称な微分方程式が時間反転対称性を破る解を持つ場合があるということです。そして、元の方程式の対称性を反映して、そのような解は互いに時間反転対称な「崩壊する解」と「成長する解」のペアで現れます。ここまでは、イジング模型の自発的対称性の破れに状況が似ています。しかし、これだけでは時間の矢の問題の解決にはならない点に注意が必要です。時間の矢とは、時間が正に進むときに、崩壊する解が成長する解より頻繁に現れるという現象です。イジング模型では2状態のどちらが選ばれるかは誰も気にしませんが、時間の矢の問題では、崩壊する解がより多く選ばれる理由まで示さないと解決にならないのです。

例えば、よく行われる「再帰時間」を使った説明は、この条件を満たしていません。輻射場中の励起原子は最初は崩壊するでしょうが、輻射場が有限体積のキャビティーに閉じ込められていれば、原子はいつかは初期状態に戻ってきます。それにかかる時間が再帰時間です。キャビティーを大きくすれば再帰時間は長くなり、無限に大きくなれば、戻ってくるのに無限時間を待たなければいけないことになります。こうして時間の矢が生じるというのが再帰時間による説明です。これは、無限に大きな系で時間反転対称性

を破る解が現れることを示唆しています。以下の第3節でも、これを別の方法で示します。しかし再帰時間の説明は、なぜ崩壊する解が卓越して選ばれるのかということについて何も言っていません。もちろん崩壊するのが「自然」なのですが、それがなぜ「自然」なのかを説明することこそ時間の矢の問題解決に不可欠なもう一つの段階なのです。本稿では、その説明を第5節・第6節で与えます。

3. 第1段階：「共鳴状態」(崩壊状態)と「反共鳴状態」(成長状態)

前置きが長くなりましたが、いよいよ本論に入ります。まず、第1段階としてシュレーディンガー方程式が時間反転対称性を破る解を持ち得ることを示します。古くから知られている「共鳴状態」を導入するために、散乱状態の透過確率を見てみましょう。図1(a)の井戸型ポテンシャルの透過確率が図1(b)です。いくつも共鳴ピークがあります。実は透過確率の式を複素エネルギーに解析接続すると多くの極があり(図1(c)), 共鳴ピークは、これら「共鳴極」における発散の裾野を実エネルギー軸上で見ているのです。

透過確率はグリーン関数 $(E-H)^{-1}$ の要素に比例するので、透過確率の極はグリーン関数の極でもあります。したがって共鳴極はハミルトニアン H のスペクトルの一部、離散固有値の一種であると考えられます。この固有状態が歴史的に「共鳴状態」と呼ばれてきました。

実際に、共鳴状態は定常シュレーディンガー方程式の解として定義することができます。解が

$$|x| \rightarrow \infty \text{において } \psi(x) \propto e^{ik|x|} \quad (1)$$

となるという「Siegert境界条件」を課して定常シュレーディンガー方程式を解くと共鳴状態が得られます。⁸⁻¹¹⁾これが透過確率 $T(E)$ の極に対応していることは以下のようにしてわかります。透過確率は、図1(a)の散乱状態において入射波の振幅 $A(E)$ と透過波の振幅 $C(E)$ から $T(E) = |C(E)/A(E)|^2$ と求められます。したがって透過確率 $T(E)$

の極は、散乱状態の入射波振幅 $A(E)$ のゼロ点に相当します。¹²⁾つまり共鳴状態は入射波 A がなく、反射波 B と透過波 C という外向波のみからなります。これがSiegert境界条件の意味するところ です。

図1(c)と(d)は、実際に井戸型ポテンシャル(図1(a))の場合にSiegert境界条件の下で求めた離散的固有状態の固有エネルギー $\{E_n\}$ と固有波数 $\{k_n\}$ です。補遺1(サプラメンタルマテリアル)に計算方法を示しました。学部生でも追える簡単な計算ですので、是非ご覧になって下さい。

言葉の定義のため、図1(c)と(d)の離散固有値を分類しておきます。まず複素波数平面(図1(d))で正の虚軸上にある解(緑点)は、波動関数が遠方で $\psi_n(x) \propto e^{-\kappa_n|x|}$ ($\kappa_n > 0$) となることからわかるように、通常の束縛状態です。複素エネルギー平面(図1(c))では負の実軸上にあります。次に複素波数平面の第4象限、複素エネルギー平面の下半面にある解(赤点)が「共鳴状態」です。波動関数(1)に時間依存性も加えた形

$$\Psi_n(x, t) = \psi_n(x) e^{-iE_n t} \sim e^{ik_n|x| - iE_n t} \quad (2)$$

を考えると(ただし $\hbar=1$)、波数 k_n の実部が正、エネルギー E_n の虚部が負なので、粒子が遠方に逃げ、それに応じて波動関数が時間と共に指数関数的に減衰することを表しています。つまり「共鳴状態」は崩壊する解です。誤解を避けるため、以下では歴史的な呼び名「共鳴状態」の代わりに「崩壊状態」という名称を使うことにします。

一方、複素波数平面の第3象限、複素エネルギー平面の上半面にある解(青点)は歴史的に「反共鳴状態」と呼ばれています。波数 k_n の実部が負、エネルギー E_n の虚部が正なので、粒子が遠方から入射し、それに応じて波動関数が時間と共に増大することを表しています。つまり「反共鳴状態」は成長する解であり、崩壊状態の時間反転対称な解になっています。以下では「反共鳴状態」を「成長状態」と呼ぶことにします。

以上をまとめると、シュレーディンガー方程式は時間反

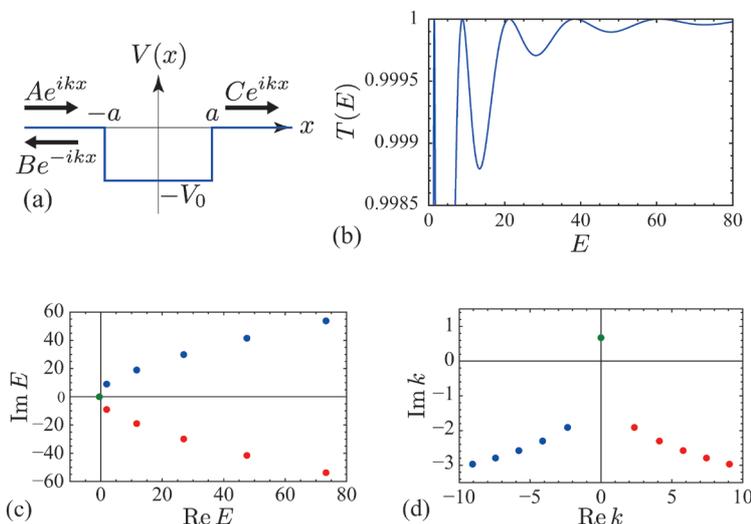


図1 (a) 井戸型ポテンシャル。散乱問題では入射波 Ae^{ikx} に対して反射波 Be^{-ikx} と透過波 Ce^{ikx} を仮定。以下では $V_0=1, a=1, \hbar=2m=1$ として計算。(b) 定常シュレーディンガー方程式の散乱状態の透過確率 T のエネルギー依存性。(c) 透過確率 $T(E)$ の複素エネルギー平面上の極。(d) それに対応する複素波数平面上の極。

転対称ですが、その解が時間反転対称性を破ることがあります。ただし図1(c)と(d)にもあるように、必ず互いに複素共役な固有値を持つ崩壊状態と成長状態のペアで現れます。両者が複素共役であることは厳密に証明できます。補遺2(サプルメンタルマテリアル)をご参照下さい。

系が無窮大でないと崩壊状態が現れないことに注意して下さい。系に端があれば、そこで反射波Bや透過波Cが跳ね返ってくるため、上の議論が成り立たなくなります。反射波や透過波が無窮遠方に逃げ去ってしまうことが、時間反転対称性を破るのに本質的なのです。

なお、複素波数平面の負の虚軸上にも解が存在する場合があります。歴史的に「反束縛状態」と呼ばれていますが、議論を省略します。これらがポテンシャル散乱の場合に存在する、全ての「離散状態」(離散固有値を持つ状態)です。

4. 第1段階(続): 「共鳴状態」についての2つの疑問

以上は古くから研究されていることなのですが、残念ながら研究者の中には「共鳴状態」を「非物理的」であるとして未だに信用しない方も多いようです。そこで崩壊状態と成長状態についての2つの典型的な疑問を提示し、それに対する私なりの答えを示します。¹³⁾

まず、井戸型ポテンシャルのハミルトニアンはエルミートなのに、なぜ複素固有値を持つのでしょうか。ハミルトニアンは確かにヒルベルト空間内ではエルミート演算子なのですが、複素固有値を持つ崩壊状態と成長状態は実はヒルベルト空間内ではなく、そこではハミルトニアンはエルミートではないのです。図1(d)からわかるように、崩壊状態も成長状態も波数 k_n の虚部は負です。したがって、波動関数(1)は遠方で発散します。その状態に対してハミルトニアンは非エルミートなのです。(実際に運動エネルギーの期待値が複素数になることを補遺3(サプルメンタルマテリアル)で示します。¹³⁾ 簡単な計算ですので、是非ご覧下さい。)そのため、固有値が複素数になっても良いのです。

上の説明から直ちに、これらの状態を規格化できないことへの疑問を持たれる方もいるかも知れません。これが「共鳴状態」に不信感を持つ研究者が多い主な理由のようです。確かに崩壊状態や成長状態は全空間では規格化できないのですが、次のような意味で確率解釈が可能です。ポテンシャルの存在する領域 $[-a, a]$ よりも広い領域 $[-L, L]$ ($L > a$)で、波動関数(2)の確率密度を積分すると、

$$N_n(t) = \int_{-L}^L |\Psi_n(x, t)|^2 dx = e^{2t \text{Im} E_n} \int_{-L}^L |\psi_n(x)|^2 dx \quad (3)$$

となります。崩壊状態では $\text{Im} E_n < 0$ なので時間と共に指数関数的に減衰します。一方、上述のように崩壊状態では粒子は遠方に逃げています。したがって、確率を保存するためには逃げる粒子を追いかけてあげなければならず、それに応じて確率密度の積分範囲 $[-L, L]$ を広げるべきという考えに

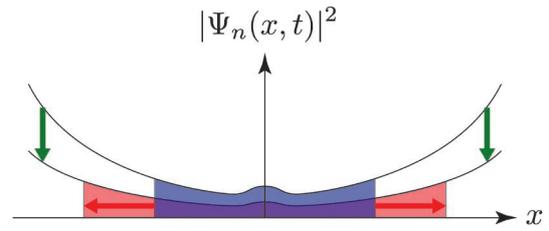


図2 時間と共に確率密度の積分範囲を半透明青領域から半透明赤領域へ赤矢印に従って広げると、同時に波動関数は緑矢印に従って指数関数的に減衰し、積分範囲内の確率は保存される。¹³⁾

至ります(図2)。粒子の速度は運動量を質量で割ったものと見なすと、状態 ψ_n の粒子の速度は($\hbar=1$ にしているので)波数の実部 $\text{Re} k_n/m (>0)$ であると推測できます。そこで式(3)において L を $L(t) = t \text{Re} k_n/m + \text{const.}$ と定義し直すと $N_n(t)$ が定数であることを証明できます。補遺4(サプルメンタルマテリアル)をご参照下さい。¹³⁾ このことから、波動関数が空間遠方で指数関数的に発散する分と、時間的に指数関数で減衰する分が打ち消し合って確率保存が成り立つことがわかります。つまり、波動関数が空間遠方で発散するのは確率解釈のためにむしろ必要なことなのです。

物理的には、崩壊状態や成長状態の遠方で発散は以下のようにして理解できます。多粒子理想気体を考えましょう。粒子間相互作用がないので、以上で議論してきた一粒子問題の確率密度が多粒子問題の粒子密度に読み替えられます。すると波動関数の発散は、大量の粒子が遠方にあることを意味します。ところが、図1(a)のように無窮遠方まで平らなポテンシャルのまま空間が続いているということは現実にはあり得ず、実際にはどこかに検出器や入射装置などの「粒子浴」が存在するでしょう。波動関数の遠方で発散は、ポテンシャルの存在する領域よりもずっと多くの(巨視的な数の)粒子が粒子浴内に存在していることを意味していると思われます。

このように、中央に興味ある有限自由度系があり、それが無限自由度を持つ外界と結合している系を開放量子系と呼び、最近、量子基礎論や非平衡統計物理学の分野で盛んに研究されています。多くの場合、中央の有限自由度系を閉じた系とした場合の離散固有状態と、無限自由度の外界の連続固有状態が、弱く結合しているとして摂動論を展開します。両者が強く結合している場合は、中央系の離散固有状態の一部の時間反転対称性が破れて崩壊状態や成長状態に転化し、有限次の摂動を超えた効果が現れるのです。

5. 第2段階: 崩壊状態・成長状態による完全系

以上で第1段階の説明を終え、第2段階として、なぜ崩壊状態が卓越して選ばれるのかを示します。「共鳴状態」の議論は量子力学の初期から存在していました¹⁴⁾が、常に崩壊状態の卓越する理由が明確に示されていませんでした。

模型としては図3のように無限空間に不純物が付属している一粒子模型を考えます。ハミルトニアン H の詳細は

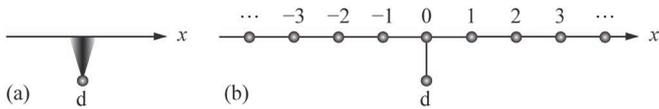


図3 (a) 無限連続空間に1つの不純物dが付属している模型.^{15,16)} (b) 無限に長いタイト・バインディング鎖に1つの不純物dが付属している模型.^{1,2,17)}

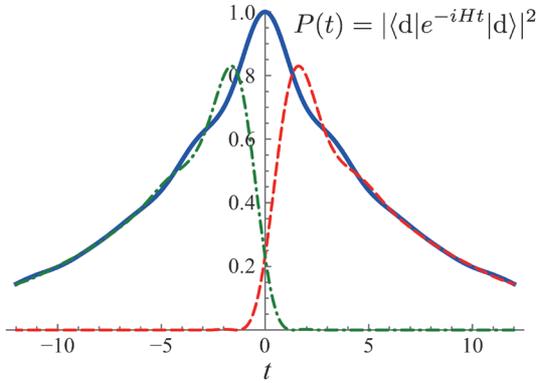


図4 図3(b)の模型の残存確率(青実線), その崩壊状態成分(赤破線)と成長状態成分(緑鎖線). 不純物ドットdの化学ポテンシャルを0.2, ドットと無限長鎖の間のホッピングを0.4とした.²⁾

補遺5(サプルメンタルマテリアル)を参照して下さい. 不純物dを二準位原子の励起状態に模せば, 基底状態に崩壊して遠方に光子が放出される状況が模式的に表されていると見なせます. 我々は図3(b)の模型(1つの不純物に半無限の鎖が2本ついている)を, 不純物が2つ以上, 半無限の鎖が3本以上の場合にも拡張しています.¹⁾ なお, ポテンシャル散乱についても以下と同様の議論があります.¹⁸⁾

時刻 $t=0$ において粒子が不純物d上にあったとして, 時刻 t において粒子が同じ不純物上に存在する「残存確率」を求めましょう. 時刻 $t=0$ での状態 $|\psi(0)\rangle=|d\rangle$ に対して, シュレーディンガー方程式の解は形式的に $|\psi(t)\rangle=e^{-iHt}|d\rangle$ と書けます. したがって残存確率は $P(t)=|\langle d|\psi(t)\rangle|^2=|\langle d|e^{-iHt}|d\rangle|^2$ で与えられます. 補遺6(サプルメンタルマテリアル)で $P(t)$ が偶関数であることを証明します. 実際に図4の青実線のように振る舞います.

さて残存確率の振幅は, グリーン関数を用いて

$$A(t)=\langle d|e^{-iHt}|d\rangle=\frac{1}{2\pi i}\int_C\langle d|\frac{1}{E-H}|d\rangle e^{-iEt}dE \quad (4)$$

と表せます. ここで積分路 C は複素エネルギー平面上で, 連続的な散乱状態(図5で正の実軸上の橙線)と離散的な束縛状態(図5で負の実軸上の緑点)を囲むようにとりまわす(図5の黒実線). これらの状態で完全系を張ることがわかっているからです.¹⁹⁾

我々はこのグリーン関数が, 別の完全系を使って

$$\langle d|\frac{1}{E-H}|d\rangle=\sum_n\frac{\langle d|\psi_n\rangle\langle\psi_n|d\rangle}{E-E_n} \quad (5)$$

の形に分解できることを示しました.^{1,2,17)} ここで和は全ての離散状態についてとりまわす. つまり束縛状態だけでなく, 崩壊状態や成長状態も和に含まれますが, 逆に連続状態

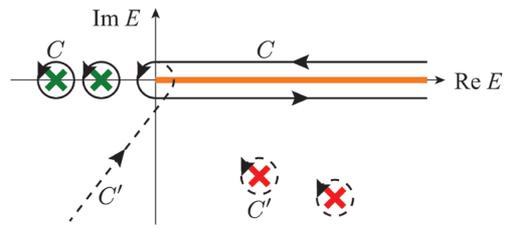


図5 積分路 C (実線)と, その変形 C' (破線). 負の実軸上の緑点が束縛状態, 下半面の赤点が崩壊状態, 正の実軸上の橙線が散乱状態.

は含まれません. 証明は論文を参照して下さい.^{1,2,17)}

崩壊状態や成長状態は空間遠方で発散しますが, この展開では不純物上での振幅だけが関係するので, 適切な規格化をとれば発散の問題は起こらないこともポイントの一つです. 不純物などのポテンシャルが存在する領域だけに限定した空間では, 離散状態だけで完全系が張られるのです. 全ての離散状態は限定された空間内で, 単位行列でない測度に基づいた正規直交性を持ちます.

6. 第2段階(続): 崩壊状態・成長状態の自動的な選択

分解(5)のもう一つ重要なポイントは, この時点ではまだ時間反転対称性は保たれているということです. 崩壊状態と成長状態の両方が対称的な形で含まれているからです.

いよいよ, 時間反転対称性を破る崩壊状態と成長状態の中から, なぜ崩壊状態が卓越して選ばれるのかをピンポイントで示します. 展開(5)を確率振幅(4)に代入すると

$$\int_C\frac{e^{-iEt}}{E-E_n}dE \quad (6)$$

という形の積分が現れます.

ここで残存確率 $P(t)$ を $t>0$ において求めたいとします. この場合, 図5の積分路のうち, 実軸のわずか上方にある積分路 C の寄与が大きくなってしまいます. そこでその部分を図5黒破線 C' のように下半面に動かすと, 被積分関数の因子 e^{-iEt} のために遠方の積分を抑制できます. そのとき同時に下半面にある崩壊状態の極(図5で下半面の赤点)を拾います. この議論から, $t>0$ の残存確率 $P(t)$ では崩壊状態の寄与が大きくなるのがわかります(図4の赤破線).^{1,2)} 逆に, $t<0$ における残存確率では成長状態の寄与が大きくなります(図4の緑鎖線).

つまり, 時間反転対称性の破れにおいては, 時刻の符号があたかもイジング模型の磁場のように働くのです. 正の時刻 $t>0$ の場合には崩壊状態が優先的に選択され, 負の時刻 $t<0$ の場合には成長状態が優先的に選択されます. 言い換えると, 初期条件問題, つまり「ある状態が初期条件として与えられたときに, その後, 何が起こるかを問う問題」の場合には自動的に崩壊状態が選択され, 逆に終末条件問題, つまり「ある状態が終末条件として与えられたときに, その前に, 何が起こったかを問う問題」の場合には自動的に成長状態が選択されるのです.¹⁾ (図4では時刻

$t=0$ で $P(0)=1$ となっているので、 $t>0$ で崩壊するのが当然のように見えるかも知れませんが、その他の状態からでも $t>0$ では崩壊が起こります。補遺6(サプルメンタルマテリアル)の図S2を参照して下さい。)

我々は普段から「自然に」初期条件問題を問いがちなので、崩壊状態を見ることが多いのです。ここまで説明してくると当然のことにように思えますが、我々が初期条件問題を問いがちなのは、実は冒頭に挙げた「心理学的時間の矢」が原因であると考え、これが決して当然ではないことがわかります。心理学的時間の矢のために、我々がそれを当然と感じてしまうだけなのです。

最後に強調しておきたいのは、我々の議論では崩壊状態や成長状態が自動的に選択されている点です。これは、遅延グリーン関数と先進グリーン関数を定義するとき分母に付与する微量の符号を論理的に説明したことになっています。上の議論では、なぜ $t>0$ で崩壊状態が卓越するかを示すために積分路を変更しましたが、もちろん積分路を変更せずに計算しても同じ答えが得られます。積分(6)をそのまま計算し、その結果の重みを式(5)に従って計算すれば、図4のように成長状態から崩壊状態へと自動的に切り替わります。また、切り替わりが徐々に起こることもわかります。これは $t\sim 0$ 付近で、崩壊状態や成長状態の寄与よりも積分路 C' からの寄与の方が大きいからです。

これまでに「共鳴状態」を使って時間反転対称性の破れを議論した研究もありましたが、それらでは狙った崩壊現象に対応する崩壊状態を「手で」選んでいました。²⁰⁻²⁵⁾ その議論では、 $t>0$ においては崩壊状態を、 $t<0$ においては成長状態を、人間が選択する必要があります。(グリーン関数の分母の微量の符号を人間が選択するのと同じです。)崩壊状態は $t<0$ では発散してしまい、成長状態は逆に $t>0$ で発散してしまうからです。残存確率 $P(t)$ を偶関数にするためには、 $t=0$ で選択を「手で」切り替える必要があります。そのため、成長状態から崩壊状態へと徐々に切り替わることも知られていませんでした。我々の手法では崩壊状態や成長状態を「手で」選んでいるのではなく、式(5)の分解係数を計算すると、自動的に、しかも徐々に成長状態から崩壊状態への切り替わりが起こります。

図4から、成長状態から崩壊状態へと徐々に切り替わるのにかかる時間は、残存確率が $t\sim 0$ 付近で放物的に減衰する時間領域「ゼノ時間」²⁶⁾に対応していることがわかります。²⁾ゼノ時間領域において残存確率が指数関数的減衰ではなく放物的減衰をすることが、「量子ゼノ効果」²⁷⁾にとっては本質的です。残存確率が純粋な指数関数的減衰からずれるのは、 $t\sim 0$ 付近で積分路 C' からの寄与が大きいためです。積分(4)を詳細に検討すると、 $t\sim 0$ 付近で放物的($1-at^2$ の形)になり、 $t\rightarrow\infty$ で冪的になることも示せます。¹⁾

7. まとめ

冒頭に戻って、放射場中の二準位原子に対する「アインシュタイン係数」の問題に答えましょう。時間反転対称性が破れて原子が崩壊する理由は、次の2つの要素の組み合わせです。まず第1段階で示したように、放射場の体積が無限大の場合、シュレーディンガー方程式には時間反転対称性を破る崩壊状態と成長状態が現れます。外向きの放射場が鏡などで反射されずに永遠に外向きに走ることがポイントです。なお、途中で述べたように、現実には外向きの放射場は検出器に吸収されて戻ってこないということに対応しています。

次に第2段階で示したように、アインシュタイン係数の問題は初期条件問題なので、崩壊状態と成長状態のうちで優先的に崩壊状態が選択されます。このようにしてアインシュタイン係数に力学的時間の矢が現れることがわかりました。通常のアインシュタイン係数の議論では純粋な指数関数的減衰しか得られませんが、我々の議論では量子ゼノ効果に対応する放物的減衰も同時に示せます。

最後に、本稿での議論は全て純粋状態に対するものでした。同様の議論をリウビル・フォンノイマン方程式に適用して、混合状態についても扱えないかと検討中です。²⁸⁾逆に、近年は巨視的な系の純粋状態によるダイナミクスから熱平衡化やエントロピー増大則を導く研究も現れています。²⁹⁻³²⁾私の知る限り、時間反転対称性が破れる理由をピンポイントで指し示した議論はまだないようです。今後、こちらの方向の研究の進展も期待されます。

参考文献

- 1) N. Hatano and G. Ordonez: J. Math. Phys. **55** (2014) 122106.
- 2) G. Ordonez and N. Hatano: arXiv (2016) 1610.01548.
- 3) 猪木慶治, 川合 光: 『量子力学II』(講談社サイエンティフィク, 1994) 第14.5節.
- 4) 花村榮一: 『量子光学』(岩波書店, 1992) 第2-2節.
- 5) R. Peierls: *Surprises in Theoretical Physics* (Princeton Univ. Press, 1979) Section 3.8.
- 6) S. Hawking: *A Brief History of Time* (Bantam Books, 1988) Chapter 9.
- 7) 例えば <https://ja.wikipedia.org/wiki/粗視化>.
- 8) A. J. F. Siegert: Phys. Rev. **56** (1939) 750.
- 9) R. E. Peierls: Proc. Roy. Soc. London A **253** (1959) 16.
- 10) 加藤幾芳, 明 孝之, 青山茂義, 池田清美: 日本物理学会誌 **53** (1998) 111.
- 11) 加藤幾芳, 池田清美: 日本物理学会誌 **61** (2006) 814.
- 12) L. D. Landau and E. M. Lifshitz: *Quantum Mechanics (Non-relativistic Theory)*, 3rd ed. (Pergamon Press, Oxford, 1977) Section 134.
- 13) N. Hatano, K. Sasada, H. Nakamura and T. Petrosky: Prog. Theor. Phys. **119** (2008) 187.
- 14) G. Gamow: Z. Phys. **51** (1928) 204.
- 15) K. O. Friedrichs: Pure Appl. Math. **1** (1948) 361.
- 16) M. Lewenstein and K. Rzazewski: Phys. Rev. A **61** (2000) 022105.
- 17) K. Sasada, N. Hatano and G. Ordonez: J. Phys. Soc. Jpn. **80** (2011) 104707.
- 18) O. I. Tolstikhin, V. N. Ostrovsky and H. Nakamura: Phys. Rev. A **58** (1998) 2077.
- 19) R. G. Newton: *Scattering Theory of Waves and Particles*, 2nd ed. (Springer-Verlag, New York, 1982) Sec. 12.1.5.
- 20) C. B. Chiu, E. C. G. Sudarshan and B. Misra: Phys. Rev. D **16** (1977) 520.
- 21) I. Prigogine, C. George, F. Henin and L. Rosenfeld: Chem. Scr. **4** (1973) 5.
- 22) T. Petrosky, I. Prigogine and S. Tasaki: Physica A **173** (1991) 175.
- 23) G. Ordonez, T. Petrosky and I. Prigogine: Phys. Rev. A **63** (2001) 052106.

- 24) T. Petrosky, G. Ordonez and I. Prigogine: Phys. Rev. A **64** (2001) 062101.
- 25) T. Berggren: Nucl. Phys. A **389** (1982) 261.
- 26) T. Petrosky and V. Barsegov: Phys. Rev. E **65** (2002) 046102.
- 27) B. Misra and E. C. G. Sudarshan: J. Math. Phys. **18** (1977) 756.
- 28) R. Nakano, N. Hatano and T. Petrosky: Int. J. Theor. Phys. **50** (2011) 1134.
- 29) P. Reimann: Phys. Rev. Lett. **101** (2008) 190403.
- 30) M. Rigol, V. Dunjko and M. Olshani: Nature **452** (2008) 854.
- 31) E. Iyoda, K. Kaneko and T. Sagawa: arXiv: 1603.07857.
- 32) T. Mori: arXiv: 1609.09776.

(2016年11月21日原稿受付)

Arrow of Time in Quantum Mechanics

Naomichi Hatano

abstract: The arrow of time is a big and long-standing problem of physics. It refers to a situation in which one phenomenon is more often observed than its time-reversal counterpart as time goes by. We pinpoint the instance at which the arrow of time appears in microscopic quantum mechanics. We first show that the Schrödinger equation, despite that it is time-reversal symmetric, can harbor eigenstates that break time-reversal symmetry. The eigenstates always appear as a pair of those which are time reversal to each other, namely decaying and growing eigenstates. We next show that the decaying eigenstates excel in the initial-state problem for $t > 0$, whereas the growing ones dominate in the terminal-state problem for $t < 0$. This explains why a two-state atom in a radiation field always decays as in the theory of the Einstein coefficients.

本記事では、本会HPの会員専用ページにおいてサブメンタルマテリアルを掲載しています。

日本物理学会誌 第72巻 第7号 (2017年7月号) 予定目次

巻頭言

今すぐアクセス!小林研介

現代物理のキーワード

物質優勢宇宙の誕生の謎に迫る岸本忠史
解説

高エネルギー宇宙ニュートリノの起源とマルチメッセンジャー
宇宙粒子物理学への展望村瀬孔大
ランダムネスが誘起するフラストレート格子上の量子スピン
液体川村 光

最近の研究から

X線天文衛星「ひとみ」が見た意外と静かなペルセウス座
銀河団中心の高温ガス大橋隆哉, 高橋忠幸, 満田和久

物理教育は今

物理学・天文学分野の参照基準: 概要と策定の意図
.....須藤彰三

JPSJの最近の注目論文から 3月の編集委員会より
.....上田和夫

学会報告

第72回年次大会 (2017年) シンポジウムの報告
.....領域委員会

学界ニュース

第57回東レ科学技術賞: 初田哲男氏矢崎絃一

新著紹介

量子力学における「時間の矢」: 補遺

羽田野直道 (東京大学生産技術研究所 hatano@iis.u-tokyo.ac.jp)

補遺 1. 井戸型ポテンシャルの共鳴状態

ここでは、本文第 3 節の共鳴状態の求め方を実演します。解く方程式は井戸型ポテンシャル (本文図 1(a))

$$V(x) = \begin{cases} -V_0 & |x| < a \text{ の場合、} \\ 0 & \text{それ以外} \end{cases} \quad (\text{S1})$$

に対する定常シュレーディンガー方程式

$$H\psi = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right) \psi(x) = E\psi(x) \quad (\text{S2})$$

です。よくご存じのように、離散解である束縛状態と連続解である散乱状態が存在しますが、本文にあるように、束縛状態以外にも離散解として共鳴状態や反共鳴状態が存在するのです。

本文式 (1) の「Siegert 境界条件」

$$|x| \rightarrow \infty \text{ において } \psi(x) \propto e^{ik|x|} \quad (\text{S3})$$

を課して定常シュレーディンガー方程式 (S2) を解くと共鳴状態が得られます。^{S1, S2, S3, S4} 井戸型ポテンシャル (S1) の場合には、Siegert 境界条件は単純に

$$\psi(x) \propto \begin{cases} e^{-ikx} & x \leq -a \text{ において} \\ e^{ikx} & x \geq a \text{ において} \end{cases} \quad (\text{S4})$$

です。パリティによる分類も利用し、偶関数解 $\psi(x) = \psi(-x)$ について

$$\psi(x) = \begin{cases} F \cos(k'x) & 0 \leq x < a \text{ の場合、} \\ C e^{ikx} & x > a \text{ の場合、} \end{cases} \quad (\text{S5})$$

奇関数解 $\psi(x) = -\psi(-x)$ について

$$\psi(x) = \begin{cases} F \sin(k'x) & 0 \leq x < a \text{ の場合、} \\ C e^{ikx} & x > a \text{ の場合、} \end{cases} \quad (\text{S6})$$

と分けて解くと良いでしょう。ここで

$$k' = \sqrt{k^2 + \frac{2mV_0}{\hbar^2}} \quad (\text{S7})$$

です。係数 C の項が Siegert 境界条件 (S3) に相当します。

学部の量子力学の問題と同様に接続条件

$$\psi(a-0) = \psi(a+0) \quad (\text{S8})$$

$$\psi'(a-0) = \psi'(a+0) \quad (\text{S9})$$

を課します。偶関数について

$$F \cos(k'a) = C e^{ika} \quad (\text{S10})$$

$$-F k' \sin(k'a) = C i k e^{ika}, \quad (\text{S11})$$

奇関数について

$$F \sin(k'a) = Ce^{ika} \quad (S12)$$

$$Fk' \cos(k'a) = Cike^{ika}, \quad (S13)$$

となります。辺々を割ると、超越方程式

$$ik = \begin{cases} -k' \tan(k'a) & \text{偶関数解の場合、} \\ k' \cot(k'a) & \text{奇関数解の場合、} \end{cases} \quad (S14)$$

が得られます。これら方程式の解が離散的に得られます(本文図 1(d))。それを $\{k_n\}$ と書くことにすると、エネルギー固有値は $E_n = \hbar^2 k_n^2 / (2m)$ です(本文図 1(c))。これら複素解 $\{E_n\}$ もシュレーディンガー方程式の固有状態です。

補遺 2. 崩壊状態と成長状態の複素共役性

ここでは、崩壊状態(共鳴状態)と成長状態(反共鳴状態)が必ず複素共役なペアで現れることを示します。まず、ハミルトニアン H が時間反転対称であるとし、時間反転対称操作を T と書くと、

$$[H, T] = 0 \quad (S15)$$

ということです。

さて、ハミルトニアン H に対して、ある複素固有値 E_n を持つ固有状態 $|\psi_n\rangle$ があつたとしましょう。つまり

$$H|\psi_n\rangle = E_n|\psi_n\rangle \quad (S16)$$

とします。左から時間反転対称操作 T を演算した式

$$TH|\psi_n\rangle = TE_n|\psi_n\rangle \quad (S17)$$

において、左辺は交換関係 (S15) から T と H が交換しますが、右辺では E_n が E_n^* となります:

$$HT|\psi_n\rangle = E_n^*T|\psi_n\rangle. \quad (S18)$$

なぜなら、量子力学における時間反転対称操作 T は、複素共役操作が含まれるからです。

ここで、式 (S18) が示すのは、 H は複素固有値 E_n^* も持ち、その固有状態は $T|\psi_n\rangle$ であることがわかります。つまり $|\psi_n\rangle$ が崩壊状態なら $T|\psi_n\rangle$ は成長状態であり、両者の固有値は互いに複素共役であることが示せました。

補遺 3. ハミルトニアンの非エルミート性

崩壊状態(共鳴状態)と成長状態(反共鳴状態)の存在する関数空間は複素波数平面(本文図 1(d))の下半面です。これは複素エネルギー平面(本文図 1(c))の第 2 リーマン面に相当します。この関数空間では、式 (S2) のハミルトニアン

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \quad (S19)$$

は非エルミート演算子になります。これを確かめましょう。

エルミート演算子に対しては、「任意の状態」に関する期待値が実数になります。実際に、ハミルトニアン (S19) は L_2 で収束する関数(自乗可積分関数)について期待値が実数になりますので、そのような関数空間(ヒルベルト空間)ではエルミート演算子です。

しかし、遠方で発散する崩壊状態や成長状態の波動関数に対しては期待値が一般に複素数になります。これを確かめるため、特に運動エネルギーの期待値を調べてみましょう。部分積分を行うと^{S5)}

$$\langle \psi_n | \frac{d^2}{dx^2} | \psi_n \rangle = \lim_{L \rightarrow \infty} \int_{-L}^L \psi_n^* \psi_n'' dx = \lim_{L \rightarrow \infty} [\psi_n^* \psi_n']_{x=-L}^L - \lim_{L \rightarrow \infty} \int_{-L}^L \psi_n'^* \psi_n' dx \quad (S20)$$

となり、右辺第 2 項は実数ですが、右辺第 1 項は有限の L に対して一般に複素数です。自乗可積分関数に対しては $L \rightarrow \infty$ でこの項がゼロになるので期待値が実数になるのですが、崩壊状態や成長状態に対してはこの項は発散します。こうして、

運動エネルギーが非エルミートであることがわかります。このため、ハミルトニアン (S19) の固有値が複素数になってもおかしくありません。

式 (S20) の物理的な意味を明らかにするために、3次元空間に拡張すると

$$\text{Im} \int_{\Omega} \langle \psi | H | \psi \rangle dV = -\frac{\hbar}{2m} \text{Re} \int_{\partial\Omega} \langle \psi | \hat{p}_n | \psi \rangle dS \quad (\text{S21})$$

という等式が証明できます。^{S5)} ここで、左辺は3次元空間のある有限領域 Ω 内の体積分、右辺はその領域の表面 $\partial\Omega$ 上の面積分です。また \hat{p}_n は、運動量の表面 $\partial\Omega$ に鉛直な成分です。右辺が式 (S20) の右辺第1項に由来します。一方で、時間依存するシュレーディンガー方程式

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\Psi(x, t)\rangle = H |\Psi(x, t)\rangle \quad (\text{S22})$$

を用いると

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega} \langle \Psi(x, t) | \Psi(x, t) \rangle dV = \frac{2}{\hbar} \text{Im} \int_{\Omega} \langle \Psi | H | \Psi \rangle dV \quad (\text{S23})$$

という等式も証明できます。^{S5)} つまり、ある領域内の粒子数の時間変化はハミルトニアンの期待値の虚部で表されます。

2つの式 (S21) と (S23) を組み合わせると、

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega} \langle \Psi(x, t) | \Psi(x, t) \rangle dV = -\frac{1}{m} \text{Re} \int_{\partial\Omega} \langle \psi | \hat{p}_n | \psi \rangle dS \quad (\text{S24})$$

となり、ある領域内の粒子数の時間変化は、その領域から出ていく運動量流束に比例するという、自然な結論が得られます。式 (S20) は、その1次元版であると理解できます。つまり、右辺第1項は、領域 $[-L, L]$ の左右端から出て行く運動量流束を表しています。

補遺 4. 確率保存の証明

本文式 (3) の確率が保存することを証明しましょう。ただし L は

$$L(t) = t \frac{\text{Re} \hbar k_n}{m} + \text{const.} \quad (\text{S25})$$

と置き換え

$$N_n(t) = \int_{-L(t)}^{L(t)} |\Psi_n(x, t)|^2 dx \quad (\text{S26})$$

とします。なお、ポテンシャルが存在する領域 $[-a, a]$ よりも $[-L(t), L(t)]$ が必ず広くなるようにとります。このとき

$$\dot{N}_n(t) = \int_{-L(t)}^{L(t)} \left(\frac{d}{dt} |\Psi_n(x, t)|^2 \right) dx + \dot{L}(t) \left(|\Psi_n(L(t), t)|^2 + |\Psi_n(-L(t), t)|^2 \right) \quad (\text{S27})$$

$$= \int_{-L(t)}^{L(t)} \left(\frac{d}{dt} |\Psi_n(x, t)|^2 \right) dx + \frac{\text{Re} \hbar k_n}{m} \left(|\Psi_n(L(t), t)|^2 + |\Psi_n(-L(t), t)|^2 \right) \quad (\text{S28})$$

となります。

式 (S28) の右辺第1項は式 (S23) と同じ変形ができます。時間依存するシュレーディンガー方程式

$$i\hbar \frac{d}{dt} \Psi_n(x, t) = H \Psi_n(x, t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right) \Psi_n(x, t) \quad (\text{S29})$$

を用いると、

$$\frac{d}{dt} |\Psi_n(x, t)|^2 = \Psi_n(x, t)^* \frac{1}{\hbar} \frac{d}{dt} \Psi_n(x, t) + \Psi_n(x, t) \frac{1}{\hbar} \frac{d}{dt} \Psi_n(x, t)^* \quad (\text{S30})$$

$$= -\frac{i}{\hbar} \Psi_n(x, t)^* H \Psi_n(x, t) + \frac{i}{\hbar} \Psi_n(x, t) H^* \Psi_n(x, t)^* \quad (\text{S31})$$

$$= \frac{1}{i\hbar} [\Psi_n(x, t)^* H \Psi_n(x, t) - (\Psi_n(x, t)^* H \Psi_n(x, t))^*] \quad (\text{S32})$$

$$= \frac{2}{\hbar} \text{Im} (\Psi_n(x, t)^* H \Psi_n(x, t)) \quad (\text{S33})$$

となります。したがって式 (S28) の右辺第 1 項は

$$\int_{-L(t)}^{L(t)} \left(\frac{d}{dt} |\Psi_n(x, t)|^2 \right) dx = \frac{2}{\hbar} \text{Im} \int_{-L(t)}^{L(t)} \Psi_n(x, t)^* H \Psi_n(x, t) dx \quad (\text{S34})$$

となります。これは式 (S23) に相当します。

次に、式 (S34) の右辺において、ハミルトニアン H のうちでポテンシャルの項 $V(x)$ に関する積分は実数です。式 (S20) からわかるように、式 (S34) 右辺の積分結果の虚部は運動エネルギーの境界項から生じます。つまり

$$\frac{2}{\hbar} \text{Im} \int_{-L(t)}^{L(t)} \Psi_n(x, t)^* H \Psi_n(x, t) dx = -\frac{\hbar}{m} \text{Im} \int_{-L(t)}^{L(t)} \Psi_n(x, t)^* \Psi_n''(x, t) dx \quad (\text{S35})$$

$$= -\frac{\hbar}{m} \text{Im} [\Psi_n(x, t)^* \Psi_n'(x, t)]_{-L(t)}^{L(t)} \quad (\text{S36})$$

です。ところで、本文式 (1) の Siegert 境界条件から、波動関数 $\psi_n(x)$ は $|x| = \pm L(t) > a$ において

$$\Psi_n(x, t) \propto e^{ik_n|x| - iE_n t/\hbar} \quad (\text{S37})$$

の形をしているはずですが、したがって

$$\Psi_n'(L(t), t) = ik_n \Psi_n(L(t), t), \quad (\text{S38})$$

$$\Psi_n'(-L(t), t) = -ik_n \Psi_n(-L(t), t), \quad (\text{S39})$$

となるので、

$$\begin{aligned} [\Psi_n(x, t)^* \Psi_n'(x, t)]_{-L(t)}^{L(t)} &= \Psi_n(L(t), t)^* \Psi_n'(L(t), t) - \Psi_n(-L(t), t)^* \Psi_n'(-L(t), t) \\ &= \Psi_n(L(t), t)^* (ik_n) \Psi_n(L(t), t) - \Psi_n(-L(t), t)^* (-ik_n) \Psi_n(-L(t), t) \\ &= ik_n \left(|\Psi_n(L(t), t)|^2 + |\Psi_n(-L(t), t)|^2 \right) \end{aligned} \quad (\text{S40})$$

となります。これを式 (S36) に代入すると、式 (S28) の右辺第 1 項は結局

$$\int_{-L(t)}^{L(t)} \left(\frac{d}{dt} |\Psi_n(x, t)|^2 \right) dx = -\frac{\text{Re} \hbar k_n}{m} \left(|\Psi_n(L(t), t)|^2 + |\Psi_n(-L(t), t)|^2 \right) \quad (\text{S41})$$

となります。

最後に、式 (S41) を式 (S28) の右辺第 1 項に代入すれば、ちょうど第 2 項と打ち消し合って $\dot{N}(t) = 0$ となることがわかります。こうして、積分範囲を広げながら確率密度を積分すると、確率が保存することがわかります。

補遺 5. 模型のハミルトニアン

模型としては本文図 3 のように無限空間に不純物が付属している一粒子模型を考えます。ハミルトニアンは、本文図 3(a) の模型^(S6, S7) がパラメータ ω_d, g, β に対して

$$H = \int_{-\infty}^{\infty} dk \omega_k |k\rangle\langle k| + \omega_d |d\rangle\langle d| + \int_{-\infty}^{\infty} dk V_k (|k\rangle\langle d| + |d\rangle\langle 0|) \quad (\text{S42})$$

です。ただし

$$\omega_k = |k|, \quad (\text{S43})$$

$$V_k = g \sqrt{\frac{\beta |k|}{|k| + \beta}} \quad (\text{S44})$$

とおきます。右辺第 1 項の $|k\rangle$ は、無限に長い 1 次元上の状態 $|x\rangle$ をフーリエ変換した状態です。第 2 項の $|d\rangle$ は付属している不純物ドット上に粒子が存在している状態です。第 3 項の 1 次元系とドットの間のカップリングをフーリエ逆変換すると、ドット $|d\rangle$ からホップできるのはほとんど $|x| < \beta^{-1}$ 付近の状態 $|x\rangle$ だけであることがわかります (図 S1)。

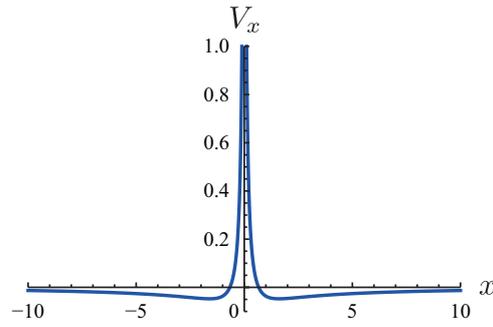


図 S1: 式 (S44) のフーリエ逆変換 V_x の実空間表示 (ただし $\beta = 1$)。原点 $x = 0$ では発散。

また、本文図 3(b) の模型^{S8, S9, S10} がパラメータ ε_d と g に対して

$$H = -t \sum_{x=-\infty}^{\infty} (|x+1\rangle\langle x| + |x\rangle\langle x+1|) + \varepsilon_d |d\rangle\langle d| + g (|0\rangle\langle d| + |d\rangle\langle 0|) \quad (\text{S45})$$

です。ここで $|x\rangle$ は粒子が無限に長い鎖上のサイト x に存在している状態、 $|d\rangle$ は付属している不純物ドット上に粒子が存在している状態です。右辺第 1 項が無限に長い鎖上のホッピングを、第 2 項が付属している不純物の化学ポテンシャルを、第 3 項が不純物サイトと鎖上のサイト 0 の間のホッピングを表しています。

補遺 6. 残存確率 $P(t)$ が偶関数であることの証明

残存確率

$$P(t) = |A(t)|^2, \quad \text{ただし } A(t) = \langle d|e^{-iHt}|d\rangle, \quad (\text{S46})$$

が t に関して偶関数であることを証明しましょう。時間反転操作 T が $T^2 = 1$ であるとする

$$A(t) = \langle d|T^2 e^{-iHt}|d\rangle \quad (\text{S47})$$

です。(時間反転操作が $T^2 = -1$ である場合も考えられますが、残存確率 $P(t)$ には影響しません。)

ところで、ハミルトニアン (S42) も (S45) は時間反転対称なので $[H, T] = 0$ です。また状態 $|d\rangle$ も時間反転操作 T によって不変なので $T|d\rangle = |d\rangle$ です。そのため^{S10}

$$T e^{-iHt}|d\rangle = e^{iHt} T|d\rangle = e^{iHt}|d\rangle = |\psi(-t)\rangle \quad (\text{S48})$$

となります。ここで、時間反転操作 T は量子力学において複素共役を伴うことに注意して下さい。このことから

$$P(t) = |\langle \psi(0)|\psi(t)\rangle|^2 = |\langle \psi(0)|\psi(-t)\rangle|^2 = P(-t) \quad (\text{S49})$$

が導かれます (本文図 4 の青実線)。

時刻 $t = 0$ での状態が時間反転対称であれば、補遺 6 の議論はそのまま成立します。例えば時刻 $t = 0$ で

$$|\psi(0)\rangle = |d0\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} (|d\rangle + |0\rangle) \quad (\text{S50})$$

としたときの残存確率を図 S2 に示しました。この状態からでも $t > 0$ では崩壊し、 $t < 0$ では成長していることに注目して下さい。

逆に、時刻 $t = 0$ での状態 $|\psi(0)\rangle$ を時間反転対称でない状態にとると、一般には $P(t)$ は偶関数ではなくなります。極端には、 $t_0 \neq 0$ に対して

$$|\psi(0)\rangle = e^{-iHt_0}|d\rangle \quad (\text{S51})$$

を時刻 $t = 0$ での状態にすると、明らかに残存確率は偶関数ではありません。

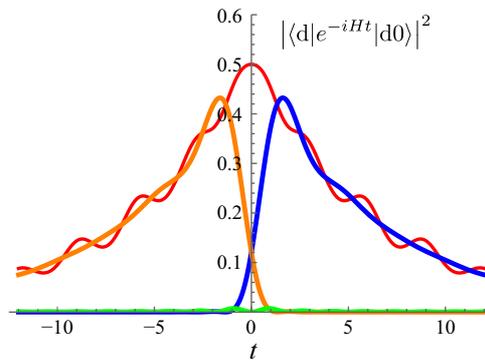


図 S2: 時刻 $t = 0$ で状態 (S50) をとるとしたときの残存確率の時間変化。

参考文献

- S1) A.J.F. Siegert, Phys. Rev. **56** (1939) 750.
 S2) R.E. Peierls, Proc. Roy. Soc. London A **253** (1959) 16.
 S3) 加藤幾芳・明孝之・青山茂義・池田清美、日本物理学会誌 **53** (1998) 111.
 S4) 加藤幾芳・池田清美、日本物理学会誌 **61** (2006) 814. 1977) Section 134.
 S5) N. Hatano, K. Sasada, H. Nakamura and T. Petrosky, Prog. Theor. Phys. **119** (2008) 187.
 S6) K.O. Friedrichs, Pure Appl. Math. **1** (1948) 361.
 S7) M. Lewenstein and K. Rzazewski, Phys. Rev. A **61** (2000) 022105.
 S8) K. Sasada, N. Hatano and G. Ordonez, J. Phys. Soc. Jpn. **80** (2011) 104707.
 S9) N. Hatano and G. Ordonez, J. Math. Phys. **55** (2014) 122106.
 S10) G. Ordonez and N. Hatano, arXiv (2016) 1610.01548.