O-26

鏡像法と量子論

Method of Images in Quantum Mechanics

○大谷聡[1]
*Satoshi Ohya[1]

Abstract : In this talk, I first discuss the method of images in quantum mechanics on quotient spaces. I then discuss a number of applications of the method, including boson-fermion duality in quantum many-body problems and probability amplitudes in quantum walk.

1．導入

鏡像法は静電ポテンシャルに対する境界値問題を解くために 1840 年代に英国の物理学者ウィリアム・トムソン（ケルヴィン卿）が見出したとされており，現在でも理工系大学生の学ぶ電磁気学で必ず登場します．電磁気学の教科書ではポアソン方程式を解くための方便として紹介されることの多い鏡像法ですが，実は鏡像法にはもう少し深い意味があります．本稿では鏡像法が基づく幾何学と対称性の理論を説き起こし，鏡像法の量子論への応用を紹介したいと思います．まずは静電気学の境界値問題の復習から始めましょう．

2．静電ポテンシャルと鏡像法

電荷密度 $\rho(\boldsymbol{r})$ の電荷と表面が接地された無限に大きい導体から成る系を考えましょう．ただし，導体は $z \leq 0$ の領域に配置され，導体表面は $z = 0$ の平面内にあるとします．このような系ではまず電荷の作る静電ポテンシャル $\phi(\boldsymbol{r})$ を求めるのが電磁気学の王道です．実際，$\phi(\boldsymbol{r})$ が分かれば，電荷の作る静電場や導体表面に誘起される電荷密度も求めることができます．

さて，その静電ポテンシャルですが，これは $\rho(\boldsymbol{r})$ が与えられたとき次の $\mathbb{R}^3/\mathbb{Z}_2 = \{(x,y,z) \in \mathbb{R}^3 : z \geq 0\}$ 上のポアソン方程式の解として定まります．

$$-\Delta\phi(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{\varepsilon_0}\rho(\boldsymbol{r}), \tag{1a}$$

$$\phi(\boldsymbol{r})|_{\text{境界}} = 0. \tag{1b}$$

ただし，Δ はラプラス演算子で，ε_0 は真空の誘電率です．この方程式の解は一般に次の積分で与えられます．

$$\phi(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{\varepsilon_0}\int_{\mathbb{R}^3/\mathbb{Z}_2} d^3\boldsymbol{r}'\, G(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')\rho(\boldsymbol{r}'). \tag{2}$$

ただし，G は $\mathbb{R}^3/\mathbb{Z}_2$ 上のグリーン関数で次を満たします．

$$-\Delta G(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}') = \delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'), \tag{3a}$$

$$G(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')|_{\text{境界}} = 0. \tag{3b}$$

要するにグリーン関数が分かれば問題は解けます．そして，このグリーン関数を構成するときに使われるのが鏡像法です．すなわち，まず一旦導体は取り除いて空間を $\mathbb{R}^3/\mathbb{Z}_2$ から $\mathbb{R}^3$ に拡張し，次に鏡像の位置に逆符号の電荷をおき，最後にこの場合の $\mathbb{R}^3$ 上のグリーン関数を求めると元々の問題の $\mathbb{R}^3/\mathbb{Z}_2$ 上のグリーン関数が得られる，というのが鏡像法です．答えは次のようになります．

$$G(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}') = \widetilde{G}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}') - \widetilde{G}(\boldsymbol{r},-\boldsymbol{r}'). \tag{4}$$

ただし，$\widetilde{G}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')$ は $\mathbb{R}^3$ 上のグリーン関数（つまり境界条件 (3b) が課されていない場合の方程式 (3a) の解）で，$\widetilde{G}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}') = 1/(4\pi|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|)$ で与えられます．

このような鏡像法による解の構成法は式 (4) が条件 (3a)(3b) を満たすことと微分方程式の解の一意性から正当化される，と説明されることが多いようです．ですが鏡像法にはまた別の見方があって，実は式 (4) の形は系が定義されている空間の幾何学と対称性から決まっています．次にこれを明らかにしたいのですが，そのためには電磁気学の静電ポテンシャルではなく量子論の時間発展演算子を考えた方が良いです．

3．時間発展演算子と鏡像法

次に量子論の時間発展演算子を考えましょう．系のハミルトン演算子を H とすると，時間発展演算子は $U_t = \mathrm{e}^{-iHt}$ で与えられます．これは t をパラメータとするユニタリー演算子で，一般に掛け算則 $U_{t_1}U_{t_2} = U_{t_1+t_2}$，ユニタリー性 $U_t^\dagger (= U_t^{-1}) = U_{-t}$，初期条件 $U_0 = 1$ を満たします．対応して，時間発展演算子の行列要素 $U_t(x,y) = \langle x|U_t|y\rangle$ は必ず次の 3 つの条件を満たさねばなりません．

- 条件 1（掛け算則）

$$\int_X dz\, U_{t_1}(x,z)U_{t_2}(z,y) = U_{t_1+t_2}(x,y). \tag{5a}$$

- 条件 2（ユニタリー性）

$$\overline{U_t(x,y)} = U_{-t}(y,x). \tag{5b}$$

- 条件 3（初期条件）

$$U_0(x,y) = \delta(x-y). \tag{5c}$$

ここで，X は系の配位空間（位置座標の空間）を表します．証明は省略しますが，この配位空間 X が商空間 $\widetilde{X}/\Gamma$

[1] 日大・教員・量科研

（ただし Γ は離散群）とみなせる場合，条件 (5a)–(5c) を満たす行列要素は次で与えられることが言えます．

$$U_t(x,y)=\sum_{\gamma\in\Gamma}D(\gamma)\widetilde{U}_t(x,\gamma y). \tag{6}$$

ただし，$D:\Gamma\to U(1)$ は離散群 Γ の１次元ユニタリー表現で，$\widetilde{U}_t(x,y)$ は大きい空間 $\widetilde{X}$ 上の時間発展演算子の行列要素です．また，γy は離散群 Γ の $y\in\widetilde{X}$ への作用を表します．式 (6) は，商空間上の行列要素を得るにはまず大きい空間に拡張し，次に大きい空間に離散群で同一視を入れ，最後に同一視したものは全て足せ，ということを表しています．ただし，足すときの重みは Γ の１次元ユニタリー表現でなければいけません．これが鏡像法の一般的構造です．配位空間の構造と離散群の表現論で式 (6) の形が決まる，というのが味噌です．

次に上の行列要素がグリーン関数とどのように関係しているのか説明しておきましょう．まず一般に，時間発展演算子 e^{-iHt} とグリーン演算子 $(H-E)^{-1}$ は互いにラプラス変換で結びついており，次の等式が成り立ちます．

$$\frac{1}{i(H-E)}=\int_0^\infty dt\ \mathrm{e}^{-iHt}\,\mathrm{e}^{+iEt}\quad\text{for}\quad\operatorname{Im}E>0. \tag{7}$$

この等式より，式 (6) をラプラス変換することで商空間 $\widetilde{X}/\Gamma$ 上のグリーン関数 $G_E(x,y)=\langle x|(H-E)^{-1}|y\rangle$ が得られます．答えは次のようになります．

$$G_E(x,y)=\sum_{\gamma\in\Gamma}D(\gamma)\widetilde{G}_E(x,\gamma y). \tag{8}$$

ただし $\widetilde{G}_E(x,y)=i\int_0^\infty dt\,\widetilde{U}_t(x,y)\,\mathrm{e}^{iEt}$ です．特に $X=\mathbb{R}^3/\mathbb{Z}_2$ かつ $H=-\Delta$ の場合で，更に $D:\mathbb{Z}_2\to U(1)$ として定義表現が選ばれた場合の式 (8) の極限 $E\to 0_+$ が前節のグリーン関数 (4) となります．

最後に公式 (6) を用いた最近の応用例を２つ紹介して終わりにしたいと思います．

４．量子多体問題への応用：ボーズ・フェルミ双対性

まず１つ目の応用が量子力学の同種粒子多体問題です．量子論では同種粒子は原理的に識別不可能ですが，この識別不可能性より，１粒子配位空間を X とすると同種 n 粒子系の配位空間は必ず商空間 X^n/S_n になります．ただし，S_n は n 次対称群です．前節の一般論より，この商空間上の行列要素 $U_t(x,y)$ の構成は対称群 S_n の１次元ユニタリー表現の分類の問題に帰着されるわけですが，これは次の２通りしかありません．

$$D(\sigma)=\begin{cases}1 & \text{（自明表現）}\\ \operatorname{sgn}(\sigma) & \text{（符号表現）}\end{cases} \tag{9}$$

ただし，$\operatorname{sgn}(\sigma)$ は置換 σ の符号で，偶置換に対しては $+1$，奇置換に対しては -1 で定義されます．物理的には自明表現がボゾンに対応し，符号表現がフェルミオンに対応します．X^n 上の行列要素 $\widetilde{U}_t(x,y)$ が与えられたとき，自明表現で構成されるのがボゾンの理論，符号表現で構成されるのがフェルミオンの理論になるわけですが，実はこの２つが全く等価になる場合があります．これがボーズ・フェルミ双対性で，次の条件式で表されます．

$$\sum_{\sigma\in S_n}\widetilde{U}_t^{[\mathrm{B}]}(x,\sigma y)=\sum_{\sigma\in S_n}\operatorname{sgn}(\sigma)\widetilde{U}_t^{[\mathrm{F}]}(x,\sigma y). \tag{10}$$

ただし，$\widetilde{U}_t^{[\mathrm{B}]}(x,y)$ と $\widetilde{U}_t^{[\mathrm{F}]}(x,y)$ は２つの異なる X^n 上の理論の行列要素です．実は $X=\mathbb{R}$ の場合で，かつ粒子間相互作用が２体接触相互作用の場合は条件式 (10) を満たす理論を完全に分類することが可能です [1]．また，このボーズ・フェルミ双対性を用いて１次元同種 n 体問題におけるエフィモフ効果を議論することもできます [2]．

５．量子情報科学への応用：量子ウォーク

２つ目の応用が公式 (6) の離散空間への拡張です．積分を和に，デルタ関数をクロネッカーのデルタに置き換えることで，公式 (6) は配位空間が離散空間の場合にも成り立ちます [3]．離散空間上の量子力学は量子情報科学の分野では特に量子ウォークと呼ばれ，そこでは粒子を見出す確率振幅が重要なのですが，これはまさに鏡像法を用いて構成できます．

例えば量子探索問題などへの応用として完全グラフ上の１粒子量子ウォークがよく考察されています．完全グラフとは任意の２頂点が繋がっているグラフのことですが，これは長距離ホッピングのある円周 $\mathbb{Z}_N=\mathbb{Z}/N\mathbb{Z}$（$N$ は格子数）上の量子力学系だとみなすことができます．これは商空間なので，公式 (6) よりこの系の確率振幅は必ず次の形を取ることが言えます．

$$U_t(x,y)=\sum_{n=-\infty}^{\infty}\mathrm{e}^{in\theta}\,\widetilde{U}_t(x,y+nN). \tag{11}$$

ただし θ は表現のパラメータです．量子ウォークの分野ではこのような公式はこれまで知られていなかったのですが，今後は鏡像法を用いてこれまで解析が困難であった系に対しても確率振幅の構造が明らかになっていくものと思われます．

６．まとめ

鏡像法は静電ポテンシャルを構成する方法として登場しましたが，この方法はむしろ量子論でその意味が明確になります．本稿では鏡像法を用いてボーズ・フェルミ双対性や量子ウォークへの応用を簡単に論じました．配位空間が商空間になるような問題では鏡像法が使えるので，今後は上記以外にも様々な応用が考えられていくでしょう．

参考文献

[1] S. Ohya, Annals Phys. **434** (2021) 168657.
[2] S. Ohya, Phys. Rev. A **105** (2022) 033312.
[3] S. Ohya, Phys. Rev. A **107** (2023) 062202.