O-16

PT 対称なハミルトニアンにおける固有値問題
ー非エルミートなハミルトニアンの実スペクトルー
Eigenvalue problems in PT-symmetric Hamiltonians: Real Spectra in non-Hermitian Hamiltonians

○牧田遼[1]
*Ryo Makita

Abstract: In conventional quantum mechanics, it is necessary for Hamiltonians to be Hermitian in order for energy to take real numbers. However, in recent years, it is known that non-Hermitian Hamiltonians can have real eigenvalues in the presence of PT symmetry. PT symmetry is the invariance under the conversion which performs P (parity) reversal and T (time) reversal at the same time. For example, Hamiltonian $H = p^2/2 + i\omega^2 z^3/2$ is non-Hermitian but PT symmetric. In this study, we show that the Hamiltonian represented by $H = p^2/2 + \omega^2 z^2 (iz)^\epsilon/2$ has real eigenvalues. Next, the relationship between symmetry and storage in a system with PT symmetry is examined from both classical and quantum mechanics systems, and the orbit closes and periodicity is compared.

1　導入

従来の量子力学ではエネルギーが実数値を取ることに対応してハミルトニアンがエルミートであるとされたが，近年別の可能性として空間反転と時間反転を同時に行った PT 対称性を持つハミルトニアンが議論されている．もし非エルミートで PT 対称なハミルトニアンのスペクトルが実数値をとるならば定説を覆すものである．本研究では文献 [?]， [?] のレビューをし具体的にハミルトニアン $H = p^2/2 + \omega^2 z^2 (iz)^\epsilon/2$ の PT 対称性及びエネルギーの実数性を調べる．それにより PT 対称な系で粒子の運動がどのように振る舞うかを考察する．

パリティ即ち空間反転を行う．空間反転の操作を適用すると座標 z は $z \to -z$ となることを要請する．運動量 p は $-i\,d/dz$ と同様であるため空間反転のもとで $p \to -p$ となるのが自然である．

一方時間反転は時刻 $t = 0$ で運動を反転させる $t \to -t$ [?, ?, ?]．シュレディンガー方程式

$$i\frac{\partial \psi}{\partial t} \;=\; H\psi \tag{1}$$

の両辺に $t \to -t$ すると，$\psi(z,t)$ が解であるとき $\psi(z,-t)$ は解でないことがわかる．しかし更に両辺に複素共役をとると，$\psi^*(z,-t)$ は解であることが確かめられる．従って $t = 0$ で時間反転するとき，反転後の波動関数は ψ^* で与えられる [?]．

ハミルトニアン

$$H \;=\; \frac{p^2}{2} + \frac{\omega^2 z^2}{2}(iz)^\epsilon \tag{2}$$

について考える．このとき交換関係 $[z,p] = i$ が T 変換のもとで不変となる [?] ために，z と p を複素数として考える．P 反転と T 反転の操作を同時に行うと $\epsilon \geq 0$ の場合にもとの H と等価であることがわかる．

2　エネルギーの実数性

波動関数 $|\phi\rangle$ に対し，PT 変換を施す．

$$PT|\phi\rangle \;=\; \lambda|\phi\rangle \tag{3}$$

ここで P は空間反転演算子，T は時間反転演算子である．空間反転を 2 回行うと元の状態に戻るので $P^2 = 1$ であり，空間反転も同様に $T^2 = 1$ である．P はユニタリーだが，T は複素共役をとるため反ユニタリーでなければならない．式（3）に更に PT を作用すると $P^2T^2 = \lambda\lambda^* = 1$ が得られるので $\lambda = \exp(i\alpha)$ と置くと，式（3）より $PT\exp(i\alpha/2)|\phi\rangle = \exp(i\alpha/2)|\phi\rangle$ となり $\exp(i\alpha/2)|\phi\rangle$ を改めて $|\phi\rangle$ と表すことにすると次式が得られる．

$$PT|\phi\rangle \;=\; |\phi\rangle \tag{4}$$

ハミルトニアン H が PT 対称である $[PT, H] = 0$ ことと，エネルギー固有方程式よりエネルギーは実数であることが示される [?]．

$$E^* \;=\; E \tag{5}$$

3　古典力学系

式（1）のハミルトニアンをハミルトン方程式に代入すると

$$\frac{dz}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p} = p, \quad \frac{dp}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial z} = \frac{i\omega^2}{2}(2+\epsilon)(iz)^{1+\epsilon} \tag{6}$$

から以下の運動方程式が得られる [?]．

$$\frac{d^2 z}{dt^2} \;=\; \frac{i\omega^2}{2}(2+\epsilon)(iz)^{1+\epsilon} \tag{7}$$

両辺に dz/dt を掛けて時間 t で積分するとエネルギー保存則

$$\frac{1}{2}\left(\frac{dz}{dt}\right)^2 - \frac{\omega^2}{2}(iz)^{2+\epsilon} \;=\; E \tag{8}$$

[1]日大理工・院（前）・物理

及び１階の微分方程式が得られる．

$$\frac{dz}{dt} = \pm\sqrt{2E+\omega^2(iz)^{2+\epsilon}} \tag{9}$$

dz/dt が 0 になる点を（古典的）転回点と呼ぶ．右辺は多価関数であり平方根で 2 価である．n を自然数とすると $2E+\omega^2(iz)^{2+\epsilon}$ は $2+\epsilon=n$ の場合 1 価，$2+\epsilon=1/n$ の場合 n 価である．$dz/dt=0$ より（古典的）転回点は偏角 $2\pi/(2+\epsilon)$ ごとにとる．式（9）は初期条件 $z(0)$，$dz(0)/dt$ が与えられれば解くことができる．

調和振動子ポテンシャル $\epsilon=0$ の解は式（7），式（9）より

$$z(t) = z(0)\cos(\omega t) \pm \sqrt{\frac{2E}{\omega^2}-z(0)^2}\sin(\omega t) \tag{10}$$

と求まる．粒子の軌道は楕円軌道をとり，経路が閉じていることがわかる．

次に $\epsilon=1$ のとき，式（2）よりハミルトニアンが

$$H = \frac{p^2}{2}+i\frac{\omega^2 z^3}{2} \tag{11}$$

で表される．H は実部と虚部それぞれで保存する．$z=x+iy$，$p=p_x+ip_y$ とおくとハミルトニアンの実部 H_R と虚部 H_I はそれぞれ $p=dz/dt$ であることを用いると

$$H_R = \frac{\dot{x}^2-\dot{y}^2}{2}+\frac{\omega^2}{2}y(y^2-3x^2)=E \tag{12}$$

$$H_I = \dot{x}\dot{y}+\frac{\omega^2}{2}x(x^2-3y^2)=0 \tag{13}$$

となる．E は一定である．ここで P 反転 $x\to -x$，$y\to -y$ を行うとポテンシャルは不変ではないことが見て取れる．ポテンシャルは $x\to -x$，$y\to y$ の変換のもとで不変なため，軌道は y 軸対称である．式（13）より $\dot{x}\dot{y}=0$ 即ち $\dot{x}=0$ or $\dot{y}=0$ であるとき $x=0,\pm\sqrt{3}y$ となる．逆に $x=0,\pm\sqrt{3}y$ であるとき $\dot{x}=0$ or $\dot{y}=0$ を満たす．$\dot{x}\dot{y}$ の符号で場合分けを行うと描画される軌道が閉じることが読み取れる．但し例外として初期条件を $x=0$ and $\dot{x}=0$ のようにとった場合は粒子は虚軸上に束縛され無限に落下するので軌道は閉じない．このように例外を除くと一般にハミルトニアンが PT 対称であるならば軌道が閉じ，周期的な運動をすることが示される [?].

4　量子力学系

従来の量子力学ではハミルトニアンがエルミートであることに対応するような内積を定義していた．PT 対称性を持つ量子力学において PT 内積 [?, ?, ?] と呼ばれる内積

$$(f,g) = \int dx f^*(-x)g(x) \tag{14}$$

がハミルトニアンが PT 対称であることに対応する．しかし PT 内積ではノルムが負になってしまい確率が定義できない．そこで新たに荷電共役対称性（C 対称性）を考える．C 反転は粒子の電荷の符号を変える変換である．CPT 対称な系の内積，CPT 内積を以下で定義する．

$$\langle f|g\rangle = \int_c dx f^{CPT}(x)g(x) \tag{15}$$

$$f^{CPT}(x) = \int_c dy C(x,y)f^*(-y) \tag{16}$$

エネルギーが異なるとき波動関数は直交し，ノルムは正になるので従来の量子力学と同様に議論することができる．CPT 内積の積分経路 c は波動関数が無限遠で 0 になるような境界条件を満たすようにとる [?]．ここで，$C(x,y)$ の具体的な形については波動関数を $\phi_n(x)\equiv\langle x|E_n\rangle$ で定義すると

$$C(x,y) = \sum_n \phi_n(x)\phi_n(y) \tag{17}$$

となる [?].

5　結論と今後の課題

ハミルトニアンが非エルミートであっても PT 対称であるならばエネルギーが実数であり，PT 対称な系における粒子の軌道は周期的で一般的に閉じている．問題として運動エネルギーが負になるような項が出てくるが実際にそのような物理系が存在するのか，また CPT 内積について一般に複素数を含むので値が一意に定まらないことが挙げられる．今後は別の ϵ，特に PT 対称ではない場合においてエネルギーや粒子の振る舞い，また P や T ではない実数固有値を持つ別の演算子の可能性について考察を深めたい．

参考文献

[1] C. M. Bender, S. Boettcher and P. Meisinger, “PT symmetric quantum mechanics,” J. Math. Phys. **40** (1999), 2201-2229.

[2] J. J. Sakurai， 桜井明夫訳,「現代の量子力学（下）」，吉岡書店，366-400p，2015.

[3] C. M. Bender, “Making sense of non-Hermitian Hamiltonians,” Rept. Prog. Phys. **70** (2007), 947.

[4] C. M. Bender, “Introduction to PT-Symmetric Quantum Theory,” Contemp. Phys. **46** (2005), 277-292.

[5] S. Weigert, “Completeness and orthonormality in PT-symmetric quantum systems,” Phys. Rev. A **68** (2003), 062111.

[6] C. M. Bender and A. Turbiner, “Analytic continuation of Eigenvalue problems,” Phys. Lett. A **173** (1993), 442-446.