

量子力学 II

井上 研三

平成23年6月13日

目次

第1章	量子力学の体系	1
1.1	波動関数と状態ベクトル	1
1.2	エルミート演算子と基底ベクトル	4
1.3	座標演算子	10
1.4	表示の変換	11
1.5	運動量演算子	13
1.6	量子力学の運動法則	15
1.7	シュレディンガー描像とハイゼンベルグ描像	17
第2章	調和振動子	21
2.1	調和振動子	21
2.2	昇降演算子	22
2.3	ハミルトニアン固有値と固有ベクトル	22
2.4	座標表示固有関数	25
2.5	ハイゼンベルグ描像	26
第3章	角運動量	29
3.1	角運動量の代数	29
3.2	角運動量の表現	30
3.3	軌道角運動量	32
3.4	スピン角運動量	35
3.5	2個のスピン $\frac{1}{2}$ の合成	37
3.6	一般の角運動量の合成	39
3.7	ウィグナー・エッカート (Wigner-Eckart) の定理	40
第4章	摂動論	43
4.1	時間によらない摂動	43
4.2	摂動展開	44
4.3	縮退のない場合の解	45
4.4	縮退がある場合	47
4.5	時間による摂動	48
4.6	スピン磁気共鳴 ($s = \frac{1}{2}$)	50
4.7	相互作用描像	52

第 5 章	散乱理論	55
5.1	散乱断面積と散乱振幅	55
5.2	リップマン・シュヴィンガー方程式	57
5.3	ボルン近似	59
5.4	部分波展開	60
5.5	散乱振幅	62
5.6	剛体球による散乱	64
第 6 章	量子力学における近似法	67
6.1	準古典近似	67
6.2	変分法	72
6.3	切断近似	74
付 録 A	公式集	77

第1章 量子力学の体系

1.1 波動関数と状態ベクトル

量子力学的状態

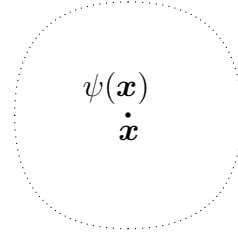
質点の量子力学 (座標 \mathbf{x} , 運動量 \mathbf{p})

- 波動関数 $\psi(\mathbf{x})$: 座標 \mathbf{x} の複素関数

$|\psi(\mathbf{x})|^2 \propto$ [粒子が \mathbf{x} に存在する確率密度]

$\int d^3\mathbf{x} \psi^*(\mathbf{x})\psi(\mathbf{x}) < \infty$: 2乗可積分な関数

* 通常 $\int d^3\mathbf{x} \psi^*\psi = 1$ と規格化 : 全確率は 1



- 物理量 $F(\mathbf{x}, \mathbf{p})$ の期待値

$$\langle F \rangle = \int d^3\mathbf{x} \psi^*(\mathbf{x}) \tilde{F}(\tilde{\mathbf{x}}, \tilde{\mathbf{p}}) \psi(\mathbf{x}), \quad \tilde{\mathbf{p}} \equiv -i\hbar\nabla, \quad \nabla \equiv \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}}$$

$$\tilde{F} : \text{演算子} \begin{cases} \tilde{\mathbf{x}}\psi(\mathbf{x}) \Rightarrow \mathbf{x}\psi(\mathbf{x}) & : \text{座標演算子} \\ \tilde{\mathbf{p}}\psi(\mathbf{x}) \Rightarrow -i\hbar\nabla\psi(\mathbf{x}) & : \text{運動量演算子} \end{cases}$$

- 正準交換関係 $[A, B] \equiv AB - BA$

$$[\tilde{x}, \tilde{p}_x] = [\tilde{y}, \tilde{p}_y] = [\tilde{z}, \tilde{p}_z] = i\hbar, \quad \text{他の交換関係は } 0$$

$$\text{まとめて} \quad [\tilde{x}_i, \tilde{p}_j] = i\hbar\delta_{ij} \quad (i, j = x, y, z)$$

重ね合わせの原理とベクトル空間

- 2つの異なる状態 $\psi_1(\mathbf{x}), \psi_2(\mathbf{x})$ が実現可能なとき

重ね合わせの状態

$$\psi(\mathbf{x}) = c_1\psi_1(\mathbf{x}) + c_2\psi_2(\mathbf{x}) \quad c_1, c_2 : \text{複素数}$$

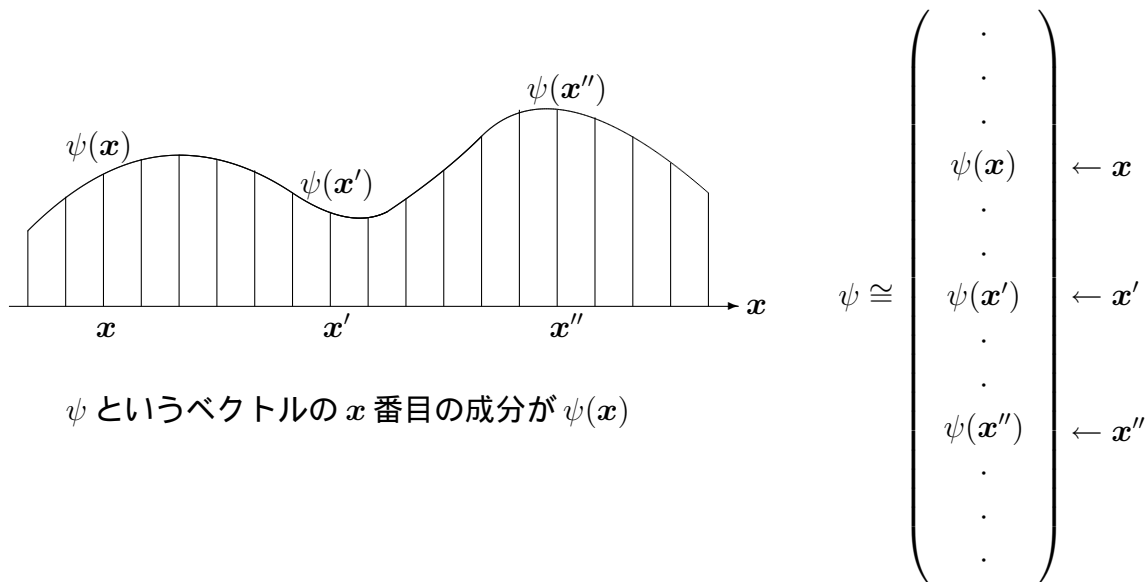
も実現される。

- 一般に重ね合わせの原理が成り立つ空間は (複素) ベクトル空間と呼ばれる。

$$\begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \end{pmatrix}, \dots, \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ u_n \end{pmatrix}, \dots \quad u_i : \text{複素数}$$

\uparrow \uparrow \uparrow
 2次元 3次元 n次元

- $\psi(x)$ は無限次元ベクトル空間のベクトル



ベクトルのノルム

$$u = \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix} \quad \|u\|^2 \equiv u_1^* u_1 + u_2^* u_2$$

$$\|u\| : u \text{ のノルム, } \|u\|^2 \geq 0 \text{ 正定値}$$

- 一般に

$$u = \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ u_n \end{pmatrix} \quad \text{たてベクトル}$$

$$u^\dagger = (u_1^*, u_2^*, \dots, u_n^*) \quad \text{横ベクトル}$$

を定義すると

$$\|u\|^2 = u^\dagger u \equiv u_1^* u_1 + u_2^* u_2 + \dots + u_n^* u_n \geq 0$$

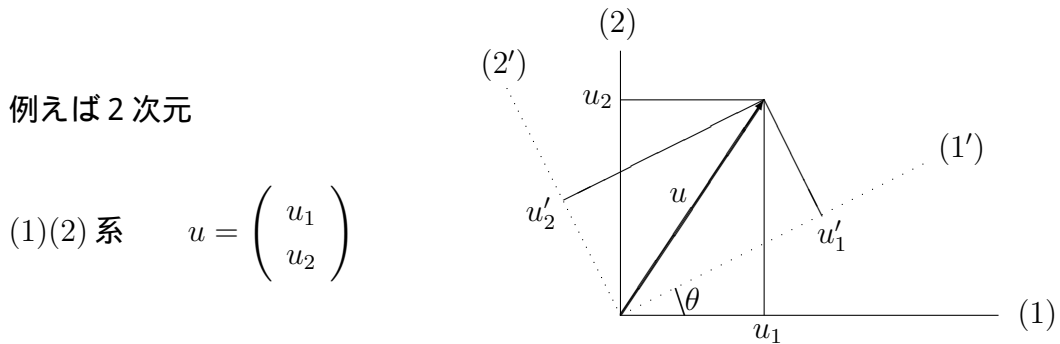
$$\|\psi\|^2 \equiv \int d^3\mathbf{x} \psi^*(\mathbf{x})\psi(\mathbf{x}) \sim \sum_{\mathbf{x}_i} \psi^*(\mathbf{x}_i)\psi(\mathbf{x}_i)$$

ベクトルのスカラー積

$$u = \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ u_n \end{pmatrix}, \quad v = \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ v_n \end{pmatrix}$$

$$v^\dagger u = v_1^* u_1 + v_2^* u_2 + \dots + v_n^* u_n, \quad u^\dagger v = (v^\dagger u)^*$$

- ベクトルの成分はベクトル空間の基底のとり方による。



(1')(2') 系 $u' = \begin{pmatrix} u'_1 \\ u'_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_1 \cos \theta + u_2 \sin \theta \\ -u_1 \sin \theta + u_2 \cos \theta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta \\ -\sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix}$

$\equiv Uu$ U : 基底のとり方の変換にともなう変換行列

$$u' = Uu \quad U^\dagger U = U U^\dagger = 1$$

- ベクトルの成分は基底のとり方によるが スカラー積 は基底のとり方によらない!

$$v^\dagger u \quad \begin{cases} u' = Uu \\ v' = Uv \end{cases}$$

$$v'^\dagger u' = v^\dagger U^\dagger U u = v^\dagger u$$

- ベクトルのノルムも勿論基底のとり方によらない。

ブラケット記法 成分で表わす前のベクトル

$$\begin{aligned} u &\Rightarrow |u\rangle && \text{ケットベクトル} \\ u^\dagger &\Rightarrow \langle u| && \text{ブラケット} \\ u^\dagger v &\Rightarrow \langle u|v\rangle && \text{ブラケット：ただの複素数} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} c_1 u + c_2 v &\Rightarrow c_1 |u\rangle + c_2 |v\rangle \\ (c_1 u + c_2 v)^\dagger &\Rightarrow c_1^* \langle u| + c_2^* \langle v| \end{aligned}$$

$$\langle u|v\rangle = \langle v|u\rangle^*$$

$$\langle u|u\rangle \equiv \| |u\rangle \|^2 \geq 0 \quad : \quad |u\rangle \text{ のノルム}$$

$\langle u|v\rangle = 0$ のとき $|u\rangle$ と $|v\rangle$ は直交するという。

[例題] $|\alpha_i\rangle \quad i = 1, \dots, n, \quad \langle \alpha_i | \alpha_j \rangle = \delta_{ij}$ のとき

$$\begin{aligned} |u\rangle &= u_1 |\alpha_1\rangle + \dots + u_n |\alpha_n\rangle \equiv \sum_i |\alpha_i\rangle u_i \\ |v\rangle &= v_1 |\alpha_1\rangle + \dots + v_n |\alpha_n\rangle \equiv \sum_i |\alpha_i\rangle v_i \end{aligned}$$

と定義すると

$$\begin{aligned} \langle u|u\rangle &= \sum_i u_i^* \langle \alpha_i | \sum_j |\alpha_j\rangle u_j = \sum_i u_i^* u_i \\ \langle v|v\rangle &= \sum_i v_i^* v_i \\ \langle u|v\rangle &= \sum_i u_i^* v_i \end{aligned}$$

1.2 エルミート演算子と基底ベクトル

$$\left. \begin{array}{l} \psi(\mathbf{x}) \\ |\psi\rangle \end{array} \right\} \text{ いろんな状態 : どのような状態か?}$$

↓

物理量演算子を作用させて応答をみる。

- 物理量 $F(x, p)$: x, p や それらの関数

$$\tilde{F}(\tilde{x}, \tilde{p})\psi(x) \Rightarrow \hat{F}(\hat{x}, \hat{p})|\psi\rangle$$

状態ベクトル空間に作用する 線形演算子

- $\hat{F}(c|u\rangle) = c\hat{F}|u\rangle$ c : 任意の複素数
- $\hat{F}(|u\rangle + |v\rangle) = \hat{F}|u\rangle + \hat{F}|v\rangle$

- $\hat{F}|u\rangle \equiv |w\rangle$

行列で書くと

$$\begin{pmatrix} F_{11} & F_{12} & F_{13} & \cdot & \cdot \\ F_{21} & F_{22} & \cdot & \cdot & \cdot \\ F_{31} & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ \cdot \\ \cdot \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} F_{11}u_1 + F_{12}u_2 + F_{13}u_3 + \cdots \\ F_{21}u_1 + F_{22}u_2 + \cdots \\ F_{31}u_1 + \cdots \\ \cdots \\ \cdots \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} w_1 \\ w_2 \\ w_3 \\ \cdot \\ \cdot \end{pmatrix}$$

エルミート共役

$$\hat{F}|u\rangle \equiv |w\rangle \quad \begin{pmatrix} & & \\ & F & \\ & & \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \cdot \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} w_1 \\ w_2 \\ \cdot \end{pmatrix}$$

ケットベクトル $|w\rangle$ に対応するブラベクトル $\langle w|$

$$(w_1^*, w_2^*, \cdots) = (u_1^*, u_2^*, \cdots)(F^*)^T$$

$$\langle w| \equiv \langle u|\hat{F}^\dagger$$

\hat{F}^\dagger : \hat{F} のエルミート共役演算子

- $\langle v|\hat{F}|u\rangle \equiv \langle v|w\rangle = \langle w|v\rangle^* \equiv \langle u|\hat{F}^\dagger|v\rangle^*$

即ち、任意の $|u\rangle, |v\rangle$ について

$$\langle u|\hat{F}^\dagger|v\rangle = \langle v|\hat{F}|u\rangle^* \quad : \quad \dagger = * \times T \quad ([\text{ダガー}] = [\text{複素共役}] \times [\text{転置}])$$

[問題] $(\hat{F}^\dagger)^\dagger = \hat{F}$, $(\hat{F}\hat{G})^\dagger = \hat{G}^\dagger\hat{F}^\dagger$ を確かめよ。

エルミート演算子

演算子 \hat{F} が

$$\hat{F}^\dagger = \hat{F}$$

を満たすとき、エルミート演算子と呼ぶ。

- 任意の $|u\rangle, |v\rangle$ について

$$\langle u|\hat{F}|v\rangle = \langle u|\hat{F}^\dagger|v\rangle = \langle v|\hat{F}|u\rangle^*$$

特に

$$\langle u|\hat{F}|u\rangle = \langle u|\hat{F}|u\rangle^* \quad : \text{実数}$$

エルミート演算子 \hat{F} の期待値は実数

- 任意の演算子 \hat{A} と \hat{A}^\dagger の積はエルミート

$$\hat{A}^\dagger\hat{A} = (\hat{A}^\dagger\hat{A})^\dagger \quad : \text{エルミート} \quad \langle u|\hat{A}^\dagger\hat{A}|u\rangle = \|\hat{A}|u\rangle\|^2 \geq 0 \quad \underline{\text{期待値は正}}$$

エルミート演算子の固有値と固有ベクトル

$$\hat{F}|f\rangle = f|f\rangle \quad \begin{cases} f : \text{ただの数} : \hat{F} \text{ の固有値} \\ |f\rangle : \hat{F} \text{ の固有ベクトル} \end{cases}$$

- $\langle f|\hat{F}|f\rangle = f\langle f|f\rangle$ が実数 $\Rightarrow f = f^*$

エルミート演算子の固有値は実数

- $f\langle f| = \langle f|\hat{F}^\dagger = \langle f|\hat{F}$

$$\text{よって} \quad \begin{cases} \hat{F}|f\rangle = f|f\rangle \\ \langle f|\hat{F} = f\langle f| \end{cases}$$

- $\langle f'|\hat{F}|f\rangle = f'\langle f'|f\rangle = f\langle f'|f\rangle$

$$\text{よって} \quad (f' - f)\langle f'|f\rangle = 0$$

$$f' \neq f \quad \Rightarrow \quad \langle f'|f \rangle = 0$$

異なる固有値の固有ベクトルは直交する。

規格化

固有値が離散的な場合、 $\langle f|f \rangle = 1$ と規格化

$$\langle f'|f \rangle = \delta_{f'f}$$

固有値が連続的な場合、デルタ関数で規格化

$$\langle f'|f \rangle = \delta(f' - f)$$

固有値の縮退

エルミート演算子 \hat{F} に、等しい固有値 f を持つ複数の一次独立な固有ベクトルが存在するとき

$$\hat{F}|f;1\rangle = f|f;1\rangle, \quad \hat{F}|f;2\rangle = f|f;2\rangle, \quad \dots, \quad \hat{F}|f;n_f\rangle = f|f;n_f\rangle \quad \underline{n_f \text{ 重縮退}}$$

- $|f;i\rangle$ の線形結合 $\sum_{j=1}^{n_f} |f;j\rangle c_{ji}$ を改めて $|f;i\rangle$ とおき

$$\langle f;i|f;j \rangle = \delta_{ij}$$

となるように $|f;i\rangle$ を定めることができる。(例えばシュミットの直交化。演習問題 (I-1-2) 参照)

正規直交基底

エルミート演算子 \hat{F} の固有ベクトルの集合 $\{|f\rangle\}$ は正規直交基底をなす。任意の状態 $|\psi\rangle$ は基底ベクトル $|f\rangle$ で展開できる。

$$|\psi\rangle = \sum_f |f\rangle \psi(f) \quad \text{離散的 } f \text{ (縮退しているベクトルについても和)}$$

$$\text{or } \left(|\psi\rangle = \int df |f\rangle \psi(f) \quad \text{連続的 } f \right)$$

$$\bullet \langle f'|\psi\rangle = \sum_f \langle f'|f\rangle \psi(f) = \psi(f') \quad (\because \langle f'|f\rangle = \delta_{f'f})$$

$$\therefore \psi(f) = \langle f|\psi\rangle$$

完全性

$$|\psi\rangle = \sum_f |f\rangle \langle f|\psi\rangle \quad \left(\int df |f\rangle \langle f|\psi\rangle \right)$$

$$\therefore \sum_f |f\rangle \langle f| = \hat{1} \text{ (単位演算子)} \quad \left(\int df |f\rangle \langle f| = \hat{1} \right)$$

$|f\rangle$ を基底ベクトルとする表示

$$|\psi\rangle = \sum_f |f\rangle \psi(f)$$

$$\psi(f) = \langle f|\psi\rangle \quad : \quad F\text{-表示の波動関数}$$

$$\bullet \langle f|\hat{F}|\psi\rangle = \sum_{f'} \langle f|\hat{F}|f'\rangle \langle f'|\psi\rangle \equiv \sum_{f'} F_{ff'} \langle f'|\psi\rangle$$

$$F_{ff'} \equiv \langle f|\hat{F}|f'\rangle = f' \delta_{ff'} \quad F = \begin{pmatrix} f_1 & 0 & 0 & \cdot \\ 0 & f_2 & 0 & \cdot \\ 0 & 0 & f_3 & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \end{pmatrix} \quad \underline{\hat{F}\text{を対角化する表示}}$$

$$\bullet \langle f|\psi\rangle : \text{状態 } |\psi\rangle \text{ において物理量 } \hat{F} \text{ が確定値 } f \text{ をとる確率振幅}$$

$$\begin{aligned} \langle F \rangle &\equiv \langle \psi|\hat{F}|\psi\rangle = \sum_f \langle \psi|\hat{F}|f\rangle \langle f|\psi\rangle \\ &= \sum_f f \langle \psi|f\rangle \langle f|\psi\rangle \\ &= \sum_f f |\langle f|\psi\rangle|^2 \end{aligned}$$

$$|\langle f|\psi\rangle|^2 : \hat{F} \text{ が確定値 } f \text{ をとる確率}$$

$$\langle F \rangle : \text{状態 } |\psi\rangle \text{ における } \hat{F} \text{ の期待値}$$

同時固有ベクトル

二つの独立なエルミート演算子 \hat{F} と \hat{G} が同時固有ベクトルを持っているとする。

$$\hat{F}|f, g\rangle = f|f, g\rangle$$

$$\hat{G}|f, g\rangle = g|f, g\rangle$$

$$\hat{G}\hat{F}|f, g\rangle = \hat{G}f|f, g\rangle = f\hat{G}|f, g\rangle = fg|f, g\rangle$$

$$\hat{F}\hat{G}|f, g\rangle = \hat{F}g|f, g\rangle = g\hat{F}|f, g\rangle = gf|f, g\rangle$$

よって

$$(\hat{F}\hat{G} - \hat{G}\hat{F})|f, g\rangle = 0$$

↓ $|f, g\rangle$ は完全系をなしている

$$[\hat{F}, \hat{G}] = 0$$

即ち \hat{F} と \hat{G} が同時固有ベクトルを持つための条件は

$$[\hat{F}, \hat{G}] = 0$$

★ 一般に、可換な maximal な独立なエルミート演算子のセット \hat{F}_i ($i = 1, \dots, r$)

$$[\hat{F}_i, \hat{F}_j] = 0 \quad i, j = 1, \dots, r$$

の同時固有ベクトル

$$\hat{F}_i|f_1, f_2, \dots, f_r\rangle = f_i|f_1, f_2, \dots, f_r\rangle \quad i = 1, \dots, r$$

によって状態ベクトルの基底をラベル付けする。

• 規格・直交・完全性は (離散的な場合)

$$\langle f'_1, f'_2, \dots | f_1, f_2, \dots \rangle = \delta_{f'_1 f_1} \delta_{f'_2 f_2} \dots$$

$$\sum_{f_1, f_2, \dots} |f_1, f_2, \dots\rangle \langle f_1, f_2, \dots| = \hat{1}$$

1.3 座標演算子

座標 $\mathbf{x} = (x, y, z)$ に対応した量子論的演算子

$$\hat{\mathbf{x}} \equiv (\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}) \quad : \quad \text{互いに可換なエルミート演算子}$$

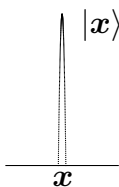
固有値 $\mathbf{x} = (x, y, z)$ は連続実数

\hat{x} の固有ベクトル

$$\hat{\mathbf{x}}|\mathbf{x}\rangle = \mathbf{x}|\mathbf{x}\rangle \quad \begin{cases} \hat{x}|\mathbf{x}\rangle = x|\mathbf{x}\rangle \\ \hat{y}|\mathbf{x}\rangle = y|\mathbf{x}\rangle \\ \hat{z}|\mathbf{x}\rangle = z|\mathbf{x}\rangle \end{cases} \quad |\mathbf{x}\rangle \equiv |x, y, z\rangle$$

$$\langle \mathbf{x}' | \mathbf{x} \rangle = \delta(x' - x)\delta(y' - y)\delta(z' - z) \equiv \delta^3(\mathbf{x}' - \mathbf{x})$$

$|\mathbf{x}\rangle$: 粒子が座標点 \mathbf{x} に局在している状態



完全性

$$\int d^3\mathbf{x} |\mathbf{x}\rangle\langle \mathbf{x}| = \hat{1} \quad d^3\mathbf{x} \equiv dx dy dz$$

$$|\psi\rangle = \int d^3\mathbf{x} |\mathbf{x}\rangle\langle \mathbf{x}|\psi\rangle \equiv \int d^3\mathbf{x} |\mathbf{x}\rangle\psi(\mathbf{x})$$

$\psi(\mathbf{x}) = \langle \mathbf{x}|\psi\rangle$: 座標表示 (x -表示) の波動関数

状態 $|\psi\rangle$ において座標 \hat{x} が確定値 x をとる確率振幅

• 任意の状態 $|\psi\rangle$ と $|\psi'\rangle$ のスカラー積 $\langle \psi'|\psi\rangle$ は

$$\langle \psi'|\psi\rangle = \int d^3\mathbf{x} \langle \psi'|\mathbf{x}\rangle\langle \mathbf{x}|\psi\rangle = \int d^3\mathbf{x} \psi'(\mathbf{x})^*\psi(\mathbf{x})$$

1.4 表示の変換

$$\begin{cases} \hat{F}|f\rangle = f|f\rangle & |\psi\rangle = \sum_f |f\rangle \psi^{(F)}(f) & F\text{-表示} \\ \hat{G}|g\rangle = g|g\rangle & |\psi\rangle = \sum_g |g\rangle \psi^{(G)}(g) & G\text{-表示} \end{cases}$$

$\psi^{(F)}(f) \rightarrow \psi^{(G)}(g)$ はどのような関係にあるか。

$$\psi^{(F)}(f) = \langle f|\psi\rangle$$

$$\psi^{(G)}(g) = \langle g|\psi\rangle = \langle g|\sum_f |f\rangle \langle f|\psi\rangle = \sum_f \langle g|f\rangle \langle f|\psi\rangle$$

$$\therefore \psi^{(G)}(g) = \sum_f \langle g|f\rangle \psi^{(F)}(f)$$

$G\text{-表示} \qquad f \qquad F\text{-表示}$

$$\psi^{(G)}(g) = \sum_f U_{gf} \psi^{(F)}(f) \quad U_{gf} \equiv \langle g|f\rangle \quad : \quad \text{変換行列}$$

ユニタリー性

$$\begin{cases} \langle g|f\rangle = U_{gf} \\ \langle f|g\rangle = \langle g|f\rangle^* = U_{gf}^* = U_{fg}^\dagger \\ \sum_g U_{f'g}^\dagger U_{gf} = \sum_g \langle f'|g\rangle \langle g|f\rangle = \delta_{f'f} \end{cases}$$

$$\left. \begin{array}{l} \text{よって } U^\dagger U = 1 \quad \text{単位行列} \\ \text{同様に } U U^\dagger = 1 \end{array} \right\} U : \text{ユニタリー行列}$$

★ 表示の取り替えは波動関数のユニタリー変換

行列の対角化

F -表示 $\{\hat{F}|f\rangle = f|f\rangle\}$ で行列 G を行列要素

$$G_{ff'} \equiv \langle f|\hat{G}|f'\rangle$$

で定義する。

行列 G をユニタリー変換で対角化

$$UGU^\dagger = \begin{pmatrix} g_1 & 0 & 0 & \cdot \\ 0 & g_2 & 0 & \cdot \\ 0 & 0 & g_3 & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \end{pmatrix} \quad \sum_{f,f'} U_{gf} G_{ff'} U_{f'g'}^\dagger = g \delta_{gg'}$$

することにより、 \hat{G} の固有値 g 及び固有ベクトルが

$$|g\rangle = \sum_f |f\rangle U_{fg}^\dagger$$

と求まる。

$$\begin{aligned} \therefore \hat{G}|g\rangle &= \sum_{f,f'} |f'\rangle \langle f'|\hat{G}|f\rangle U_{fg}^\dagger \\ &= \sum_{f,f'} |f'\rangle G_{f'f} U_{fg}^\dagger \\ &= \sum_{f'} |f'\rangle (GU^\dagger)_{f'g} \\ &= \sum_{f'} |f'\rangle (U^\dagger U G U^\dagger)_{f'g} \\ &= \sum_{f',g'} |f'\rangle U_{f'g'}^\dagger (U G U^\dagger)_{g'g} \\ &= \sum_{f',g'} |f'\rangle U_{f',g'}^\dagger g \delta_{g'g} \\ &= g \sum_{f'} |f'\rangle U_{f'g}^\dagger = g|g\rangle \end{aligned}$$

[例題] 2準位系 $\hat{F}|f_i\rangle = f_i|f_i\rangle$ ($i = 1, 2$) $\langle f_i|f_j\rangle = \delta_{ij}$ で、演算子 \hat{G} を

$$\hat{G} = a \{|f_1\rangle\langle f_1| + |f_2\rangle\langle f_2|\} + b \{|f_1\rangle\langle f_2| + |f_2\rangle\langle f_1|\}$$

と定義すると

$$G_{ij} \equiv \langle f_i|\hat{G}|f_j\rangle = \begin{pmatrix} a & b \\ b & a \end{pmatrix}$$

である。行列 G はユニタリー行列

$$U_{g_i, f_j} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}, \quad U_{f_i, g_j}^\dagger = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}$$

によって

$$U G U^\dagger = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a & b \\ b & a \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a+b & 0 \\ 0 & a-b \end{pmatrix}$$

と対角化される。よって \hat{G} の固有値と固有ベクトルは

$$\begin{aligned} \therefore g_1 = a + b, \quad |g_1\rangle &= \sum_i |f_i\rangle U_{f_i g_1}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} \{|f_1\rangle + |f_2\rangle\} \\ g_2 = a - b, \quad |g_2\rangle &= \sum_i |f_i\rangle U_{f_i g_2}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} \{-|f_1\rangle + |f_2\rangle\} \end{aligned}$$

である。

1.5 運動量演算子

運動量演算子

任意の状態ベクトル $|\psi\rangle$ に対して

$$\langle \mathbf{x} | \hat{\mathbf{p}} | \psi \rangle = -i\hbar \nabla \langle \mathbf{x} | \psi \rangle \quad \nabla \equiv \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}}$$

を実現するエルミート演算子 $\hat{\mathbf{p}} = (\hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z)$ を 運動量演算子 と呼ぶ。

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{x} | \hat{x}_i \hat{p}_j | \psi \rangle &= x_i \langle \mathbf{x} | \hat{p}_j | \psi \rangle = x_i (-i\hbar) \frac{\partial}{\partial x_j} \langle \mathbf{x} | \psi \rangle \\ \langle \mathbf{x} | \hat{p}_j \hat{x}_i | \psi \rangle &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_j} \langle \mathbf{x} | \hat{x}_i | \psi \rangle = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_j} (x_i \langle \mathbf{x} | \psi \rangle) \\ &= x_i (-i\hbar) \frac{\partial}{\partial x_j} \langle \mathbf{x} | \psi \rangle - i\hbar \delta_{ij} \langle \mathbf{x} | \psi \rangle \\ \therefore \langle \mathbf{x} | [\hat{x}_i, \hat{p}_j] | \psi \rangle &= i\hbar \delta_{ij} \langle \mathbf{x} | \psi \rangle \end{aligned}$$

これが任意の $|\psi\rangle$ について成立するので

$$[\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\hbar \delta_{ij} \quad \text{正準交換関係}$$

[問題] 一般の演算子 $\hat{F}(\hat{\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{p}})$ に対して

$$\langle \mathbf{x} | \hat{F}(\hat{\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{p}}) | \psi \rangle = \tilde{F}(\mathbf{x}, -i\hbar \nabla) \langle \mathbf{x} | \psi \rangle$$

が成り立つことを確かめよ。

運動量 $\hat{\mathbf{p}}$ の固有ベクトル

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{p}} | \mathbf{p} \rangle &= \mathbf{p} | \mathbf{p} \rangle \\ \Downarrow \quad \mathbf{x}\text{-表示} \end{aligned}$$

$$\langle \mathbf{x} | \hat{\mathbf{p}} | \mathbf{p} \rangle = \mathbf{p} \langle \mathbf{x} | \mathbf{p} \rangle$$

$$\therefore -i\hbar \nabla \langle \mathbf{x} | \mathbf{p} \rangle = \mathbf{p} \langle \mathbf{x} | \mathbf{p} \rangle$$

\mathbf{x} -表示の解 $\langle \mathbf{x} | \mathbf{p} \rangle$ は平面波

$$\langle \mathbf{x} | \mathbf{p} \rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{i\frac{1}{\hbar} \mathbf{p} \cdot \mathbf{x}}$$

• 規格化は

$$\begin{aligned}
 \langle \mathbf{p}' | \mathbf{p} \rangle &= \int d^3 \mathbf{x} \langle \mathbf{p}' | \mathbf{x} \rangle \langle \mathbf{x} | \mathbf{p} \rangle && (\langle \mathbf{p} | \mathbf{x} \rangle = \langle \mathbf{x} | \mathbf{p} \rangle^*) \\
 &= \int d^3 \mathbf{x} \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} e^{i\frac{1}{\hbar}(\mathbf{p} - \mathbf{p}') \cdot \mathbf{x}} \\
 &= \delta(p_x - p'_x) \delta(p_y - p'_y) \delta(p_z - p'_z) && \left(\int_{-\infty}^{\infty} dq e^{ipq} = 2\pi\delta(p) \right) \\
 &\equiv \delta^3(\mathbf{p} - \mathbf{p}')
 \end{aligned}$$

• 完全性 $\int d^3 \mathbf{p} |\mathbf{p}\rangle \langle \mathbf{p}| = \hat{1}$ $d^3 \mathbf{p} \equiv dp_x dp_y dp_z$

• $|\mathbf{p}\rangle$ の $|\mathbf{x}\rangle$ による展開

$$|\mathbf{p}\rangle = \int d^3 \mathbf{x} |\mathbf{x}\rangle \langle \mathbf{x} | \mathbf{p} \rangle = \int d^3 \mathbf{x} |\mathbf{x}\rangle \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{i\frac{1}{\hbar} \mathbf{p} \cdot \mathbf{x}}$$

運動量表示の波動関数

$$\begin{aligned}
 \langle \mathbf{p} | \psi \rangle &= \int d^3 \mathbf{x} \langle \mathbf{p} | \mathbf{x} \rangle \langle \mathbf{x} | \psi \rangle \\
 &= \int d^3 \mathbf{x} \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{-i\frac{1}{\hbar} \mathbf{p} \cdot \mathbf{x}} \psi(\mathbf{x})
 \end{aligned}$$

即ち、 \mathbf{p} -表示の波動関数は \mathbf{x} -表示の波動関数のフーリエ変換

★ 運動量表示においては

$$\begin{aligned}
 \langle \mathbf{p} | \hat{\mathbf{p}} | \psi \rangle &= \mathbf{p} \langle \mathbf{p} | \psi \rangle \\
 \langle \mathbf{p} | \hat{\mathbf{x}} | \psi \rangle &= i\hbar \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} \langle \mathbf{p} | \psi \rangle
 \end{aligned}$$

が成り立つ。

$$\begin{aligned}
 \therefore \langle \mathbf{p} | \hat{\mathbf{x}} | \psi \rangle &= \int d^3 \mathbf{x} \langle \mathbf{p} | \hat{\mathbf{x}} | \mathbf{x} \rangle \langle \mathbf{x} | \psi \rangle \\
 &= \int d^3 \mathbf{x} \mathbf{x} \langle \mathbf{p} | \mathbf{x} \rangle \langle \mathbf{x} | \psi \rangle \\
 &= \int d^3 \mathbf{x} \mathbf{x} \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{-i\frac{1}{\hbar} \mathbf{p} \cdot \mathbf{x}} \langle \mathbf{x} | \psi \rangle && \therefore \langle \mathbf{p} | \mathbf{x} \rangle = \langle \mathbf{x} | \mathbf{p} \rangle^* \\
 &= \int d^3 \mathbf{x} i\hbar \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{-i\frac{1}{\hbar} \mathbf{p} \cdot \mathbf{x}} \langle \mathbf{x} | \psi \rangle \\
 &= i\hbar \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} \int d^3 \mathbf{x} \langle \mathbf{p} | \mathbf{x} \rangle \langle \mathbf{x} | \psi \rangle \\
 &= i\hbar \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} \langle \mathbf{p} | \psi \rangle
 \end{aligned}$$

[問題] 任意の $\hat{F}(\hat{x}, \hat{p})$ について

$$\langle \mathbf{p} | \hat{F}(\hat{x}, \hat{p}) | \psi \rangle = \tilde{F}(i\hbar \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}}, \mathbf{p}) \langle \mathbf{p} | \psi \rangle$$

を確かめよ。

1.6 量子力学の運動法則

シュレディンガー方程式

- 運動：状態 $|\psi\rangle$ が時刻 t とともに変化 $\Rightarrow |\psi(t)\rangle$
- 「重ね合わせの原理」が成り立つためには、運動方程式は $|\psi(t)\rangle$ について線形

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle$$

$\hat{H}(\hat{x}, \hat{p})$: ハミルトニアン演算子 (時間推進の演算子)

- \mathbf{x} -表示の波動関数で書くと

$$\langle \mathbf{x} | \psi(t) \rangle \equiv \psi(\mathbf{x}, t)$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{x}, t) = H(\mathbf{x}, -i\hbar \nabla) \psi(\mathbf{x}, t)$$

- 例えばポテンシャル $V(\mathbf{x})$ 中の質量 m の質点

$$H = \frac{1}{2m} \mathbf{p}^2 + V(\mathbf{x})$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{x}, t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{x}) \right) \psi(\mathbf{x}, t)$$

普通のシュレディンガー方程式

確率の保存

$$\langle \psi(t) | \psi(t) \rangle = \int d^3 \mathbf{x} \langle \psi(t) | \mathbf{x} \rangle \langle \mathbf{x} | \psi(t) \rangle = \int d^3 \mathbf{x} \psi(\mathbf{x}, t)^* \psi(\mathbf{x}, t) = 1 \quad \text{全確率} = 1$$

$$\begin{cases} \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = -\frac{i}{\hbar} \hat{H} |\psi(t)\rangle \\ \frac{d}{dt} \langle \psi(t) | = \frac{i}{\hbar} \langle \psi(t) | \hat{H}^\dagger \end{cases}$$

$$\begin{aligned}
0 &= \frac{d}{dt} \langle \psi(t) | \psi(t) \rangle = \left(\frac{d}{dt} \langle \psi(t) | \right) | \psi(t) \rangle + \langle \psi(t) | \frac{d}{dt} | \psi(t) \rangle \\
&= \frac{i}{\hbar} \langle \psi(t) | \{ \hat{H}^\dagger - \hat{H} \} | \psi(t) \rangle
\end{aligned}$$

$$\therefore \hat{H}^\dagger = \hat{H} \quad \text{確率の保存} \leftrightarrow \hat{H} \text{ のエルミート性}$$

シュレディンガー方程式の解

- \hat{H} が時刻 t を陽に含まないとする。シュレディンガー方程式の解は

$$| \psi(t) \rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} | \psi(0) \rangle \quad | \psi(0) \rangle : t = 0 \text{ の状態ベクトル}$$

ここに

$$e^{\hat{X}} \equiv 1 + \hat{X} + \frac{1}{2!} \hat{X}^2 + \frac{1}{3!} \hat{X}^3 + \dots$$

であり、確かに

$$\frac{d}{dt} | \psi(t) \rangle = -\frac{i}{\hbar} \hat{H} e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} | \psi(0) \rangle = -\frac{i}{\hbar} \hat{H} | \psi(t) \rangle$$

H -表示

- \hat{H} の固有値を E_n 、固有ベクトルを $| E_n \rangle$ とする。 ($n = 1, 2, \dots$)

$$\hat{H} | E_n \rangle = E_n | E_n \rangle, \quad \langle E_n | \hat{H} = E_n \langle E_n |$$

- 規格直交完全性は (簡単のため離散的固有値とする)

$$\langle E_{n'} | E_n \rangle = \delta_{n'n}, \quad \sum_n | E_n \rangle \langle E_n | = \hat{1}$$

H -表示の波動関数

$$\begin{aligned}
c_n(t) &\equiv \langle E_n | \psi(t) \rangle = \langle E_n | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} | \psi(0) \rangle \\
&= e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} \langle E_n | \psi(0) \rangle \\
&= e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} c_n
\end{aligned}$$

$$c_n \equiv \langle E_n | \psi(0) \rangle \quad : \quad t = 0 \text{ の初期条件で決まる。}$$

$$| \psi(t) \rangle = \sum_n | E_n \rangle c_n(t) = \sum_n | E_n \rangle e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} c_n$$

定常状態 c_n が特定の $n = a$ だけに値をもつ状態 $|\psi_a(t)\rangle$

$$c_n = \delta_{na}$$

$$|\psi_a(t)\rangle = |E_a\rangle e^{-\frac{i}{\hbar} E_a t}$$

座標表示の波動関数 $\psi(\mathbf{x}, t)$

$$\psi(\mathbf{x}, t) \equiv \langle \mathbf{x} | \psi(t) \rangle = \sum_n \langle \mathbf{x} | E_n \rangle \langle E_n | \psi(t) \rangle \equiv \sum_n \phi_n(\mathbf{x}) e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} c_n$$

ここに

$$\phi_n(\mathbf{x}) \equiv \langle \mathbf{x} | E_n \rangle$$

は \hat{H} の固有ベクトル $|E_n\rangle$ の \mathbf{x} -表示の波動関数、即ち固有関数

$$\langle \mathbf{x} | \hat{H}(\hat{\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{p}}) | E_n \rangle = \tilde{H}(\mathbf{x}, -i\hbar\nabla) \langle \mathbf{x} | E_n \rangle = E_n \langle \mathbf{x} | E_n \rangle$$

$$\therefore \tilde{H}(\mathbf{x}, -i\hbar\nabla) \phi_n(\mathbf{x}) = E_n \phi_n(\mathbf{x})$$

であり、規格、直交、完全性

$$\int d^3\mathbf{x} \phi_{n'}^*(\mathbf{x}) \phi_n(\mathbf{x}) = \int d^3\mathbf{x} \langle E_{n'} | \mathbf{x} \rangle \langle \mathbf{x} | E_n \rangle = \langle E_{n'} | E_n \rangle = \delta_{n'n}$$

$$\sum_n \phi_n(\mathbf{x}) \phi_n^*(\mathbf{y}) = \sum_n \langle \mathbf{x} | E_n \rangle \langle E_n | \mathbf{y} \rangle = \langle \mathbf{x} | \mathbf{y} \rangle = \delta^3(\mathbf{x} - \mathbf{y})$$

を満たす。

1.7 シュレディンガー描像とハイゼンベルグ描像

時刻 t における物理量 $\hat{F}(\hat{\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{p}})$ の期待値

$$\langle F(t) \rangle \equiv \langle \psi(t) | \hat{F} | \psi(t) \rangle \quad : \quad \begin{array}{l} \text{シュレディンガー描像} \\ \text{状態 } |\psi(t)\rangle \text{ が } t \text{ とともに変化} \end{array}$$

シュレディンガー方程式の解

$$\begin{cases} |\psi(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} |\psi(0)\rangle \\ \langle \psi(t) | = \langle \psi(0) | \left(e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} \right)^\dagger = \langle \psi(0) | e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} \end{cases} \quad \left(\because \hat{H}^\dagger = \hat{H} \right)$$

$$\therefore \langle F(t) \rangle = \langle \psi(0) | e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} \hat{F} e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} | \psi(0) \rangle$$

- ハイゼンベルグの演算子 $\hat{F}(t)$ を

$$\hat{F}(t) \equiv e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\hat{F}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}$$

と定義すると

$$\langle F(t) \rangle = \langle \psi(0) | \hat{F}(t) | \psi(0) \rangle \quad : \quad \begin{array}{l} \text{ハイゼンベルグ描像} \\ \text{物理量 } \hat{F}(t) \text{ が } t \text{ とともに変化} \end{array}$$

特質

$$\begin{aligned} \widehat{FG}(t) &\equiv e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\hat{F}\hat{G}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\hat{F}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\hat{G}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} \\ &= \hat{F}(t)\hat{G}(t) \end{aligned}$$

- 任意のシュレディンガー演算子 $\hat{F}(\hat{x}, \hat{p})$ に対応するハイゼンベルグ演算子は

$$\hat{F}(t) \equiv e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\hat{F}(\hat{x}, \hat{p})e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} = \hat{F}(\hat{x}(t), \hat{p}(t))$$

特に注目

- $[\hat{x}_i(t), \hat{p}_j(t)] = i\hbar \delta_{ij}$
- $\hat{H}(t) = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\hat{H}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} = \hat{H}$

$$\text{即ち } \hat{H}(\hat{x}(t), \hat{p}(t)) = \hat{H}(\hat{x}, \hat{p})$$

ハイゼンベルグの運動方程式

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\hat{F}(t) &= \frac{i}{\hbar}\hat{H}e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\hat{F}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} + e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\hat{F}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\frac{-i}{\hbar}\hat{H} \\ &= -\frac{i}{\hbar}[\hat{F}(t), \hat{H}] \end{aligned}$$

$$\therefore \frac{d}{dt}\hat{F}(t) = \frac{1}{i\hbar}[\hat{F}(t), \hat{H}] \quad : \quad \hat{F} \text{ についてのハイゼンベルグの運動方程式}$$

質点系の例

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \hat{\mathbf{p}}^2 + V(\hat{\mathbf{x}})$$

$$\left. \begin{aligned} [\hat{x}_i, \hat{H}] &= [\hat{x}_i, \frac{1}{2m} \hat{\mathbf{p}}^2] = \frac{i\hbar}{m} \hat{p}_i \\ [\hat{p}_i, \hat{H}] &= [\hat{p}_i, V(\hat{\mathbf{x}})] = -i\hbar \frac{\partial V}{\partial x_i}(\hat{\mathbf{x}}) \end{aligned} \right\} \text{演習問題 (I-5-2) を参照}$$

これらがハイゼンベルグ演算子についても成り立つので 運動方程式 は

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \hat{x}_i(t) &= \frac{1}{i\hbar} [\hat{x}_i(t), \hat{H}] = \frac{1}{m} \hat{p}_i(t) \\ \frac{d}{dt} \hat{p}_i(t) &= \frac{1}{i\hbar} [\hat{p}_i(t), \hat{H}] = -\frac{\partial V}{\partial x_i}(\hat{\mathbf{x}}(t)) \end{aligned}$$

古典力学と同形！

* 期待値についての等式：エーレンフェストの定理

保存則

ハミルトニアン \hat{H} と可換な演算子

$$[\hat{F}(t), \hat{H}] = 0 \quad \Rightarrow \quad \frac{d}{dt} \hat{F}(t) = 0$$

$$\therefore \frac{d}{dt} \langle F(t) \rangle = 0$$

★ \hat{H} と可換な物理量 \hat{F} は保存量であり、その期待値はいかなる状態についても時刻 t によらない。

★ \hat{H} は \hat{H} と可換だから保存量 \Leftrightarrow エネルギーの保存則

第2章 調和振動子

2.1 調和振動子

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{p}^2 + \frac{m}{2}\omega^2\hat{x}^2 \quad \left\{ \begin{array}{l} m : \text{質量} \\ \omega : \text{角振動数} \end{array} \right.$$

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar \quad (k = m\omega^2 : \text{ばね定数})$$

まず

$$\hat{a} \equiv \frac{1}{\sqrt{2\hbar}} \left(\sqrt{m\omega} \hat{x} + i \frac{1}{\sqrt{m\omega}} \hat{p} \right)$$

$$\hat{a}^\dagger \equiv \frac{1}{\sqrt{2\hbar}} \left(\sqrt{m\omega} \hat{x} - i \frac{1}{\sqrt{m\omega}} \hat{p} \right) \quad (\hat{x}, \hat{p} \text{ はエルミート})$$

を定義する。

$$\hat{x} = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}} (\hat{a} + \hat{a}^\dagger), \quad \hat{p} = \frac{1}{2i} \sqrt{2\hbar m\omega} (\hat{a} - \hat{a}^\dagger)$$

によりハミルトニアンは

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \frac{1}{2m} \cdot \frac{-1}{4} \cdot 2\hbar m\omega (\hat{a} - \hat{a}^\dagger)^2 + \frac{m}{2}\omega^2 \cdot \frac{1}{4} \cdot \frac{2\hbar}{m\omega} (\hat{a} + \hat{a}^\dagger)^2 \\ &= \frac{\hbar\omega}{4} \left(-(\hat{a} - \hat{a}^\dagger)^2 + (\hat{a} + \hat{a}^\dagger)^2 \right) \\ &= \frac{\hbar\omega}{2} (\hat{a}^\dagger \hat{a} + \hat{a} \hat{a}^\dagger) \end{aligned}$$

又、交換関係は

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = \frac{1}{2\hbar} (-i[\hat{x}, \hat{p}] + i[\hat{p}, \hat{x}]) = 1$$

言うまでもなく

$$[\hat{a}, \hat{a}] = 0, \quad [\hat{a}^\dagger, \hat{a}^\dagger] = 0$$

2.2 昇降演算子

- ハミルトニアンは $\hat{H} = \hbar\omega(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2})$

$$[\hat{H}, \hat{a}] = \hbar\omega[\hat{a}^\dagger\hat{a}, \hat{a}] = \hbar\omega([\hat{a}^\dagger, \hat{a}]\hat{a} + \hat{a}^\dagger[\hat{a}, \hat{a}]) = -\hbar\omega\hat{a}$$

$$[\hat{H}, \hat{a}^\dagger] = \hbar\omega[\hat{a}^\dagger\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = \hbar\omega([\hat{a}^\dagger, \hat{a}^\dagger]\hat{a} + \hat{a}^\dagger[\hat{a}, \hat{a}^\dagger]) = \hbar\omega\hat{a}^\dagger$$

$$\left. \begin{aligned} [\hat{H}, \hat{a}] &= -\hbar\omega\hat{a} \\ [\hat{H}, \hat{a}^\dagger] &= \hbar\omega\hat{a}^\dagger \end{aligned} \right\} \hat{a}, \hat{a}^\dagger : \text{昇降演算子 (生成・消滅演算子)}$$

- 今 $|\psi(E)\rangle$ が \hat{H} の固有状態で固有値が E とする。

$$\hat{H}|\psi(E)\rangle = E|\psi(E)\rangle$$

$$\hat{H}\hat{a}^\dagger|\psi(E)\rangle = \left(\underbrace{[\hat{H}, \hat{a}^\dagger]}_{\hbar\omega\hat{a}^\dagger} + \hat{a}^\dagger \underbrace{\hat{H}}_E \right) |\psi(E)\rangle = (E + \hbar\omega)\hat{a}^\dagger|\psi(E)\rangle$$

$$\hat{H}\hat{a}|\psi(E)\rangle = \left(\underbrace{[\hat{H}, \hat{a}]}_{-\hbar\omega\hat{a}} + \hat{a} \underbrace{\hat{H}}_E \right) |\psi(E)\rangle = (E - \hbar\omega)\hat{a}|\psi(E)\rangle$$

即ち

$$\hat{a}^\dagger|\psi(E)\rangle \propto |\psi(E + \hbar\omega)\rangle$$

$$\hat{a}|\psi(E)\rangle \propto |\psi(E - \hbar\omega)\rangle$$

$$\begin{array}{c|c} \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot \\ E + 2\hbar\omega & \hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger|\psi(E)\rangle \\ E + \hbar\omega & \hat{a}^\dagger|\psi(E)\rangle \\ E & |\psi(E)\rangle \\ E - \hbar\omega & \hat{a}|\psi(E)\rangle \\ E - 2\hbar\omega & \hat{a}\hat{a}|\psi(E)\rangle \\ \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot \end{array}$$

2.3 ハミルトニアンの固有値と固有ベクトル

- 任意の状態 $|\psi\rangle$ について ($\langle\psi|\psi\rangle = 1$)

$$\begin{aligned} \langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle &= \hbar\omega\langle\psi|(\hat{a}^\dagger\hat{a} + 1/2)|\psi\rangle \\ &= \hbar\omega(\|\hat{a}|\psi\rangle\|^2 + 1/2) \geq \frac{\hbar\omega}{2} \end{aligned}$$

したがって \hat{H} の固有値は $\frac{\hbar\omega}{2}$ 以上

基底状態 $|0\rangle$ ($\langle 0|0\rangle = 1$)

- \hat{H} の最低固有値の状態
- $|0\rangle$ より低い固有値の状態が存在しない条件は

$$\hat{a}|0\rangle = 0$$

- 最低固有値は

$$\hat{H}|0\rangle = \hbar\omega (\hat{a}^\dagger \hat{a} + 1/2) |0\rangle = \frac{1}{2} \hbar\omega |0\rangle \equiv E_0 |0\rangle$$

$$E_0 = \frac{1}{2} \hbar\omega \quad : \quad \text{ゼロ点振動のエネルギー}$$

励起状態

$$(\hat{a}^\dagger)^n |0\rangle \equiv N_n |n\rangle \quad N_n \text{ は正の実数 (規格化因子)}$$

$$\hat{H}|n\rangle = E_n |n\rangle, \quad E_n = \hbar\omega(n + 1/2)$$

$$\langle m|n\rangle = \delta_{mn}$$

規格化因子 N_n

$$\begin{aligned} N_n^2 &= \langle 0| (\hat{a})^n (\hat{a}^\dagger)^n |0\rangle \\ &= \langle 0| (\hat{a})^{n-1} \left\{ \underbrace{[\hat{a}, (\hat{a}^\dagger)^n]}_{\Rightarrow n(\hat{a}^\dagger)^{n-1}} + (\hat{a}^\dagger)^n \hat{a} \right\} |0\rangle \\ &= n \langle 0| (\hat{a})^{n-1} (\hat{a}^\dagger)^{n-1} |0\rangle = n N_{n-1}^2 \end{aligned}$$

$$\therefore N_n = \sqrt{n} N_{n-1} = \sqrt{n(n-1)} N_{n-2} = \cdots = \sqrt{n!}$$

即ち

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (\hat{a}^\dagger)^n |0\rangle$$

\hat{a}, \hat{a}^\dagger の作用

$$\begin{aligned} \hat{a}^\dagger |n\rangle &= \hat{a}^\dagger \frac{1}{\sqrt{n!}} (\hat{a}^\dagger)^n |0\rangle = \sqrt{n+1} \frac{1}{\sqrt{(n+1)!}} (\hat{a}^\dagger)^{n+1} |0\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle \\ \hat{a} |n\rangle &= \hat{a} \frac{1}{\sqrt{n!}} (\hat{a}^\dagger)^n |0\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} \left\{ \underbrace{[\hat{a}, (\hat{a}^\dagger)^n]}_{\Rightarrow n(\hat{a}^\dagger)^{n-1}} + (\hat{a}^\dagger)^n \hat{a} \right\} |0\rangle \\ &= \sqrt{n} \frac{1}{\sqrt{(n-1)!}} (\hat{a}^\dagger)^{n-1} |0\rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle \end{aligned}$$

よって

$$\begin{aligned}\hat{a}^\dagger|n\rangle &= \sqrt{n+1}|n+1\rangle \\ \hat{a}|n\rangle &= \sqrt{n}|n-1\rangle\end{aligned}$$

数演算子 $\hat{n} \equiv \hat{a}^\dagger\hat{a}$

$$\hat{n}|n\rangle = \hat{a}^\dagger\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}\hat{a}^\dagger|n-1\rangle = n|n\rangle$$

行列表現

$$|n\rangle \text{ の } |m\rangle \text{ 表示 } \langle m|n\rangle \Rightarrow \begin{pmatrix} \langle 0|n\rangle \\ \langle 1|n\rangle \\ \vdots \\ \langle n|n\rangle \\ \vdots \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 1 \\ \vdots \\ \vdots \end{pmatrix} \quad : \text{ベクトル表現}$$

• この表示での \hat{a}, \hat{a}^\dagger の行列表現

$$\tilde{a}_{mn} \equiv \langle m|\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}\langle m|n-1\rangle = \sqrt{n}\delta_{m,n-1}$$

$$\tilde{a}^\dagger_{mn} \equiv \langle m|\hat{a}^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}\langle m|n+1\rangle = \sqrt{n+1}\delta_{m,n+1}$$

$$\tilde{a} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & \cdot \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & \cdot \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \cdot \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \sqrt{4} & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \end{pmatrix}, \quad \tilde{a}^\dagger = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \cdot \\ 1 & 0 & 0 & 0 & \cdot \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & \cdot \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \cdot \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{4} & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \end{pmatrix}$$

$$\tilde{n} = \tilde{a}^\dagger\tilde{a} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdot \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & \cdot \\ 0 & 0 & 2 & 0 & 0 & \cdot \\ 0 & 0 & 0 & 3 & 0 & \cdot \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 4 & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \end{pmatrix}, \quad \tilde{a}\tilde{a}^\dagger = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & \cdot \\ 0 & 2 & 0 & 0 & \cdot \\ 0 & 0 & 3 & 0 & \cdot \\ 0 & 0 & 0 & 4 & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \end{pmatrix}$$

$$\tilde{a}\tilde{a}^\dagger - \tilde{a}^\dagger\tilde{a} = \tilde{1} \quad \text{単位行列}$$

[問題] 行列表現で $\tilde{x}, \tilde{p}, \tilde{x}^2, \tilde{p}^2$ を計算せよ。

2.4 座標表示の固有関数

$$\nu \equiv \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \quad \text{とおくと}$$

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\nu \hat{x} + \frac{i}{\nu \hbar} \hat{p} \right)$$

$$\hat{a}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\nu \hat{x} - \frac{i}{\nu \hbar} \hat{p} \right)$$

基底状態

$$\phi_0(x) \equiv \langle x|0\rangle \quad : \quad \hat{a}|0\rangle = 0$$

$$0 = \langle x|\hat{a}|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \langle x|\nu \hat{x} + \frac{i}{\nu \hbar} \hat{p}|0\rangle$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\nu x + \frac{1}{\nu} \frac{d}{dx} \right) \langle x|0\rangle$$

$$\therefore \frac{d}{dx} \phi_0(x) = -\nu^2 x \phi_0(x) \quad \Rightarrow \quad \phi_0(x) = c e^{-\frac{\nu^2}{2} x^2}$$

規格化

$$1 = \langle 0|0\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \phi_0(x)^* \phi_0(x) = c^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\nu^2 x^2} = c^2 \frac{\sqrt{\pi}}{\nu} \quad \left(\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-x^2} = \sqrt{\pi} \right)$$

$$\therefore c = \left(\frac{\nu}{\sqrt{\pi}} \right)^{1/2}$$

励起状態

$$\begin{aligned} \phi_n(x) &= \langle x|n\rangle = N_n^{-1} \langle x|(\hat{a}^\dagger)^n|0\rangle & N_n &= \sqrt{n!} \\ &= N_n^{-1} \langle x| \left[\frac{1}{\sqrt{2}} \left(\nu \hat{x} - \frac{i}{\nu \hbar} \hat{p} \right) \right]^n |0\rangle \\ &= N_n^{-1} \left[\frac{1}{\sqrt{2}} \left(\nu x - \frac{1}{\nu} \frac{d}{dx} \right) \right]^n \langle x|0\rangle \\ &= N_n^{-1} c \left[\frac{1}{\sqrt{2}} \left(\nu x - \frac{1}{\nu} \frac{d}{dx} \right) \right]^n e^{-\frac{\nu^2}{2} x^2} & c &= \left(\frac{\nu}{\sqrt{\pi}} \right)^{1/2} \\ &= \left(\frac{\nu}{\sqrt{\pi} 2^n n!} \right)^{1/2} H_n(\nu x) e^{-\frac{\nu^2}{2} x^2} & \text{演習問題 (II-4-1) 参照} \end{aligned}$$

$$H_n(y) \equiv e^{y^2} \left(-\frac{d}{dy} \right)^n e^{-y^2} \quad : \quad \text{エルミートの多項式}$$

2.5 ハイゼンベルグ描像

• シュレディンガーの演算子

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{p}^2 + \frac{m}{2}\omega^2\hat{x}^2, \quad [\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$$

• ハイゼンベルグの演算子

$$\hat{H}(t) = \frac{1}{2m}\hat{p}(t)^2 + \frac{m}{2}\omega^2\hat{x}(t)^2 = \hat{H}, \quad [\hat{x}(t), \hat{p}(t)] = i\hbar$$

• ハイゼンベルグの運動方程式 : $\frac{d}{dt}\hat{F}(t) = -\frac{i}{\hbar}[\hat{F}(t), \hat{H}]$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\hat{x}(t) &= -\frac{i}{\hbar} \left[\hat{x}(t), \frac{1}{2m}\hat{p}(t)^2 \right] = \frac{1}{m}\hat{p}(t) \\ \frac{d}{dt}\hat{p}(t) &= -\frac{i}{\hbar} \left[\hat{p}(t), \frac{m}{2}\omega^2\hat{x}(t)^2 \right] = -m\omega^2\hat{x}(t) \end{aligned}$$

よって

$$\frac{d^2}{dt^2}\hat{x}(t) = -\omega^2\hat{x}(t), \quad \frac{d^2}{dt^2}\hat{p}(t) = -\omega^2\hat{p}(t)$$

解は

$$\begin{aligned} \hat{x}(t) &= \hat{x} \cos \omega t + \hat{p} \frac{1}{m\omega} \sin \omega t \\ \hat{p}(t) &= \hat{p} \cos \omega t - \hat{x} m\omega \sin \omega t \end{aligned}$$

[問題] $\hat{a}(t) = e^{-i\omega t}\hat{a}$, $\hat{a}^\dagger(t) = e^{i\omega t}\hat{a}^\dagger$ を導け。

[例題] 状態 $|\psi(t)\rangle$ が $t=0$ に

$$|\psi(0)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}b\hat{p}}|0\rangle \equiv |\psi_0\rangle$$

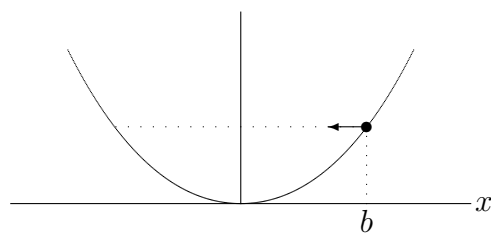
とする。時刻 t における \hat{x} , \hat{p} の期待値は

$$\begin{aligned} \langle x(t) \rangle &= \langle \psi_0 | \hat{x}(t) | \psi_0 \rangle \\ &= \langle 0 | e^{\frac{i}{\hbar}b\hat{p}} \left(\hat{x} \cos \omega t + \hat{p} \frac{1}{m\omega} \sin \omega t \right) e^{-\frac{i}{\hbar}b\hat{p}} | 0 \rangle \\ &= \langle 0 | \left((\hat{x} + b) \cos \omega t + \hat{p} \frac{1}{m\omega} \sin \omega t \right) | 0 \rangle \quad \text{演習問題 (I-5-1) 参照} \\ \langle p(t) \rangle &= \langle \psi_0 | \hat{p}(t) | \psi_0 \rangle \\ &= \langle 0 | e^{\frac{i}{\hbar}b\hat{p}} (\hat{p} \cos \omega t - \hat{x} m\omega \sin \omega t) e^{-\frac{i}{\hbar}b\hat{p}} | 0 \rangle \\ &= \langle 0 | (\hat{p} \cos \omega t - (\hat{x} + b)m\omega \sin \omega t) | 0 \rangle \end{aligned}$$

$\langle 0|\hat{x}|0\rangle = 0, \langle 0|\hat{p}|0\rangle = 0$ ($\because \langle 0|\hat{a}|0\rangle = 0, \langle 0|\hat{a}^\dagger|0\rangle = 0$) より

$$\langle x(t)\rangle = b \cos \omega t$$

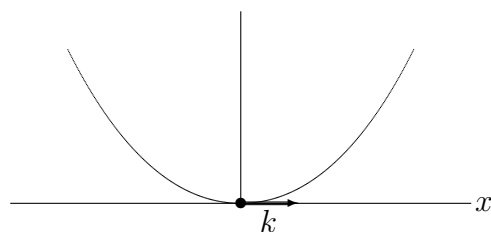
$$\langle p(t)\rangle = -bm\omega \sin \omega t$$



同様の計算を $|\psi_0\rangle = e^{\frac{i}{\hbar}k\hat{x}}|0\rangle$ について行くと

$$\langle x(t)\rangle = k \frac{1}{m\omega} \sin \omega t$$

$$\langle p(t)\rangle = k \cos \omega t$$

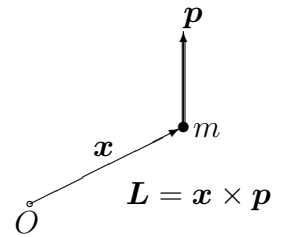


第3章 角運動量

3.1 角運動量の代数

軌道角運動量

$$\hat{L} = \hat{x} \times \hat{p} \quad \left\{ \begin{array}{l} \hat{L}_x = \hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y \\ \hat{L}_y = \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z \\ \hat{L}_z = \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x \end{array} \right.$$



- $[\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\delta_{ij}$ ($i, j = x, y, z$) より

$$\begin{aligned} [\hat{L}_x, \hat{L}_y] &= [\hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y, \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z] \\ &= \hat{y}[\hat{p}_z, \hat{z}]\hat{p}_x + \hat{x}[\hat{z}, \hat{p}_z]\hat{p}_y \\ &= -i\hbar\hat{y}\hat{p}_x + i\hbar\hat{x}\hat{p}_y \\ &= i\hbar\hat{L}_z \end{aligned}$$

- 同様にして

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar\hat{L}_z, \quad [\hat{L}_y, \hat{L}_z] = i\hbar\hat{L}_x, \quad [\hat{L}_z, \hat{L}_x] = i\hbar\hat{L}_y$$

一般の角運動量

\hat{L} と同じ形の交換関係を満たすエルミートな物理量 \hat{J}

$$[\hat{J}_x, \hat{J}_y] = i\hbar\hat{J}_z, \quad [\hat{J}_y, \hat{J}_z] = i\hbar\hat{J}_x, \quad [\hat{J}_z, \hat{J}_x] = i\hbar\hat{J}_y$$

角運動量の代数

- 昇降演算子 を

$$\hat{J}_+ \equiv \hat{J}_x + i\hat{J}_y, \quad \hat{J}_- \equiv \hat{J}_x - i\hat{J}_y \quad (\hat{J}_+^\dagger = \hat{J}_-)$$

と定義すると

$$\begin{aligned}
 [\hat{J}_z, \hat{J}_\pm] &= [\hat{J}_z, \hat{J}_x] \pm i[\hat{J}_z, \hat{J}_y] \\
 &= i\hbar\hat{J}_y \pm \hbar\hat{J}_x = \pm\hbar(\hat{J}_x \pm i\hat{J}_y) \\
 &= \pm\hbar\hat{J}_\pm \\
 [\hat{J}_+, \hat{J}_-] &= [\hat{J}_x + i\hat{J}_y, \hat{J}_x - i\hat{J}_y] = 2\hbar\hat{J}_z
 \end{aligned}$$

まとめて、角運動量の代数は

$$[\hat{J}_z, \hat{J}_\pm] = \pm\hbar\hat{J}_\pm, \quad [\hat{J}_+, \hat{J}_-] = 2\hbar\hat{J}_z$$

3.2 角運動量の表現

角運動量の大きさ

$$\hat{J}^2 = \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 + \hat{J}_z^2 \equiv \sum_i \hat{J}_i \hat{J}_i \quad (i = x, y, z)$$

任意の状態 $|\psi\rangle$ について

$$\begin{aligned}
 \langle\psi|\hat{J}^2|\psi\rangle &= \sum_i \langle\psi|\hat{J}_i \hat{J}_i|\psi\rangle = \sum_i \left| \hat{J}_i |\psi\rangle \right|^2 \geq 0 \\
 \therefore \hat{J}^2 \text{ の固有値は正もしくは } 0
 \end{aligned}$$

• \hat{J}^2 は $\hat{J}_x, \hat{J}_y, \hat{J}_z$ すべてと可換

$$\begin{aligned}
 [\hat{J}^2, \hat{J}_z] &= [\hat{J}_x^2, \hat{J}_z] + [\hat{J}_y^2, \hat{J}_z] \\
 &= [\hat{J}_x, \hat{J}_z]\hat{J}_x + \hat{J}_x[\hat{J}_x, \hat{J}_z] + [\hat{J}_y, \hat{J}_z]\hat{J}_y + \hat{J}_y[\hat{J}_y, \hat{J}_z] \\
 &= -i\hbar\hat{J}_y\hat{J}_x - i\hbar\hat{J}_x\hat{J}_y + i\hbar\hat{J}_x\hat{J}_y + i\hbar\hat{J}_y\hat{J}_x \\
 &= 0
 \end{aligned}$$

同様にして

$$[\hat{J}^2, \hat{J}_i] = 0 \quad (i = x, y, z)$$

\hat{J}^2 と \hat{J}_z の同時固有状態

$$\hat{J}^2|j, m\rangle = \hbar^2 j(j+1)|j, m\rangle \quad j \geq 0$$

$$\hat{J}_z|j, m\rangle = \hbar m|j, m\rangle$$

$$\langle j', m'|j, m\rangle = \delta_{j'j} \delta_{m'm}$$

- $[\hat{J}_z, \hat{J}_\pm] = \pm \hbar \hat{J}_\pm$, $[\hat{\mathbf{J}}^2, \hat{J}_\pm] = 0$ だったので

$$\hat{J}_z \hat{J}_\pm |j, m\rangle = (\hat{J}_\pm \hat{J}_z \pm \hbar \hat{J}_\pm) |j, m\rangle = \hbar(m \pm 1) \hat{J}_\pm |j, m\rangle$$

$$\hat{\mathbf{J}}^2 \hat{J}_\pm |j, m\rangle = \hat{J}_\pm \hat{\mathbf{J}}^2 |j, m\rangle = \hbar^2 j(j+1) \hat{J}_\pm |j, m\rangle$$

即ち $\hat{J}_\pm |j, m\rangle \sim |j, m \pm 1\rangle$ 昇降演算子

任意の状態 $|\psi\rangle$ について

$$\langle \psi | \hat{\mathbf{J}}^2 | \psi \rangle = \sum_i \langle \psi | \hat{J}_i^2 | \psi \rangle \geq \langle \psi | \hat{J}_z^2 | \psi \rangle$$

だから

$$\hbar^2 j(j+1) \geq (\hat{J}_z \text{ の固有値})^2$$

即ち、 \hat{J}_z の固有値には上限 $\hbar m_{\max}$ と

下限 $\hbar m_{\min}$ が存在して

$$\left. \begin{aligned} \hat{J}_+ |j, m_{\max}\rangle &= 0 \\ \hat{J}_- |j, m_{\min}\rangle &= 0 \end{aligned} \right\}$$

$$m_{\max} - m_{\min} = \text{整数} (\geq 0)$$

m_{\max}	$\hat{J}_+ m_{\max}\rangle = 0$ $ m_{\max}\rangle$
⋮	⋮
⋮	⋮
$m+2$	$\hat{J}_+ \hat{J}_+ m\rangle \sim m+2\rangle$
$m+1$	$\hat{J}_+ m\rangle \sim m+1\rangle$
m	$ m\rangle$
$m-1$	$\hat{J}_- m\rangle \sim m-1\rangle$
$m-2$	$\hat{J}_- \hat{J}_- m\rangle \sim m-2\rangle$
⋮	⋮
⋮	⋮
m_{\min}	$ m_{\min}\rangle$ $\hat{J}_- m_{\min}\rangle = 0$

$$\hat{J}_- \hat{J}_+ |j, m_{\max}\rangle = 0, \quad \hat{J}_+ \hat{J}_- |j, m_{\min}\rangle = 0$$

$$\hat{J}_\mp \hat{J}_\pm = (\hat{J}_x \mp i \hat{J}_y)(\hat{J}_x \pm i \hat{J}_y) = \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 \pm i [\hat{J}_x, \hat{J}_y] = \hat{\mathbf{J}}^2 - \hat{J}_z^2 \mp \hbar \hat{J}_z$$

$$j(j+1) - m_{\max}(m_{\max} + 1) = 0$$

$$j(j+1) - (-m_{\min})((-m_{\min}) + 1) = 0$$

よって

$$m_{\max} = j, \quad m_{\min} = -j$$

$$m_{\max} - m_{\min} = 2j \geq 0 \text{ の整数}$$

即ち

$$|j, m\rangle \begin{cases} j & : \text{整数もしくは半整数} \\ m = -j, -j+1, \dots, j & : 2j+1 \text{ 個} \end{cases}$$

\hat{J}_\pm の作用

$$\hat{J}_\pm |j, m\rangle = c_m^\pm |j, m \pm 1\rangle \quad c_m^\pm : \text{正の実定数とする}$$

$$\begin{aligned} (c_m^\pm)^2 &= \langle j, m | \hat{J}_\mp \hat{J}_\pm |j, m\rangle = \langle j, m | (\hat{\mathbf{J}}^2 - \hat{J}_z^2 \mp \hbar \hat{J}_z) |j, m\rangle \\ &= \hbar^2 (j(j+1) - m^2 \mp m) = \hbar^2 (j \mp m)(j \pm m + 1) \end{aligned}$$

よって

$$\begin{aligned} \hat{J}_+ |j, m\rangle &= \hbar \sqrt{(j-m)(j+m+1)} |j, m+1\rangle \\ \hat{J}_- |j, m\rangle &= \hbar \sqrt{(j+m)(j-m+1)} |j, m-1\rangle \end{aligned}$$

すべての $|j, m\rangle$ は $\hat{J}_+ |j, j\rangle = 0$ を満たす $|j, j\rangle$ から

$$\begin{aligned} \frac{\hat{J}_-}{\hbar} |j, j\rangle &= \sqrt{2j \cdot 1} |j, j-1\rangle \\ \left(\frac{\hat{J}_-}{\hbar}\right)^2 |j, j\rangle &= \sqrt{2j \cdot 1} \sqrt{(2j-1) \cdot 2} |j, j-2\rangle \\ &\vdots \\ \left(\frac{\hat{J}_-}{\hbar}\right)^n |j, j\rangle &= \sqrt{2j \cdot (2j-1) \cdots (2j-n+1) \times 1 \cdot 2 \cdots n} |j, j-n\rangle \\ &= \sqrt{\frac{(2j)! n!}{(2j-n)!}} |j, j-n\rangle \end{aligned}$$

$j-n \equiv m$ とおくと

$$|j, m\rangle = \sqrt{\frac{(j+m)!}{(2j)!(j-m)!}} \left(\frac{\hat{J}_-}{\hbar}\right)^{j-m} |j, j\rangle$$

3.3 軌道角運動量

\hat{L}^2 と \hat{L}_z の同時固有状態

$$\hat{L}^2 |l, m\rangle = \hbar^2 l(l+1) |l, m\rangle, \quad \hat{L}_z |l, m\rangle = \hbar m |l, m\rangle$$

$-l \leq m \leq l$ のすべての $|l, m\rangle$ は

$$\hat{L}_+ |l, l\rangle = 0$$

を満たす $|l, l\rangle$ から

$$|l, m\rangle = \sqrt{\frac{(l+m)!}{(2l)!(l-m)!}} \left(\frac{\hat{L}_-}{\hbar}\right)^{l-m} |l, l\rangle$$

座標表示

$$\langle \mathbf{x} | \hat{\mathbf{L}} | \psi \rangle = \tilde{\mathbf{L}} \langle \mathbf{x} | \psi \rangle \equiv -i\hbar(\mathbf{x} \times \nabla) \langle \mathbf{x} | \psi \rangle$$

極座標をもちいると

$$x = r \sin \theta \cos \phi, \quad y = r \sin \theta \sin \phi, \quad z = r \cos \theta$$

$$\begin{aligned} \tilde{L}_+ &= \tilde{L}_x + i\tilde{L}_y = \hbar e^{i\phi} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \\ \tilde{L}_- &= \tilde{L}_x - i\tilde{L}_y = \hbar e^{-i\phi} \left(-\frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \\ \tilde{L}_z &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi} \\ \tilde{\mathbf{L}}^2 &= \hbar^2 \left(-\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} - \cot \theta \frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) \end{aligned}$$

球面調和関数

$$Y_l^m(\theta, \phi) : \tilde{\mathbf{L}}^2 \text{ と } \tilde{L}_z \text{ の同時固有関数}$$

• \tilde{L}_z の固有値方程式

$$\begin{aligned} \tilde{L}_z Y_l^m &\equiv -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi} Y_l^m = \hbar m Y_l^m \Rightarrow Y_l^m \propto e^{im\phi} \\ Y_l^m(\theta, \phi + 2\pi) &= Y_l^m(\theta, \phi) \Rightarrow m, l : \text{整数} \end{aligned}$$

• $\tilde{L}_+ Y_l^l = 0$ の条件

$$\left(\frac{\partial}{\partial \theta} - l \cot \theta \right) Y_l^l = 0 \Rightarrow Y_l^l \propto (\sin \theta)^l$$

• 約束事 (規格化)

$$Y_l^l(\theta, \phi) = \frac{(-1)^l}{2^l l!} \sqrt{\frac{(2l+1)!}{4\pi}} e^{il\phi} (\sin \theta)^l$$

• $m < l$ は下降演算子 \tilde{L}_- を作用させて

$$Y_l^m(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{(l+m)!}{(2l)!(l-m)!}} \left[e^{-i\phi} \left(-\frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \right]^{l-m} Y_l^l(\theta, \phi)$$

これを整理すると (演習問題 (III-3-1) 参照)

$$Y_l^m(\theta, \phi) = (-1)^m \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} P_l^m(\cos \theta) e^{im\phi} \quad -l \leq m \leq l$$

$$P_l^m(x) \equiv \frac{1}{2^l l!} (1-x^2)^{m/2} \frac{d^{l+m}}{dx^{l+m}} (x^2-1)^l \quad : \text{ルジャンドルの陪関数}$$

$Y_l^m(\theta, \phi)$ の性質

$$\bullet e^{\pm i\phi} \left(\pm \frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right) Y_l^m(\theta, \phi) = \sqrt{(l \mp m)(l \pm m + 1)} Y_l^{m \pm 1}(\theta, \phi)$$

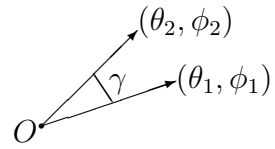
$$\bullet \int d\Omega Y_l^m(\theta, \phi)^* Y_l^{m'}(\theta, \phi) = \delta_{ll'} \delta_{mm'} \quad : \text{正規直交性}$$

$$\int d\Omega \equiv \int_0^\pi \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} d\phi \quad \text{立体角} \quad * \int d^3\mathbf{x} = \int_0^\infty r^2 dr \int d\Omega$$

$$\bullet \sum_{m=-l}^l Y_l^m(\theta_1, \phi_1) Y_l^m(\theta_2, \phi_2)^* = \frac{2l+1}{4\pi} P_l(\cos \gamma) \quad : \text{加法定理}$$

$$\cos \gamma \equiv \sin \theta_1 \sin \theta_2 \cos(\phi_1 - \phi_2) + \cos \theta_1 \cos \theta_2$$

$$P_l(x) \equiv P_l^0(x) \quad : \text{ルジャンドルの多項式}$$



$$\bullet Y_l^{-m}(\theta, \phi) = (-1)^m Y_l^m(\theta, \phi)^*$$

$$\bullet Y_l^m(\pi - \theta, \phi + \pi) = (-1)^l Y_l^m(\theta, \phi) \quad : \text{空間反転 } (\mathbf{x} \rightarrow -\mathbf{x}) \text{ 偶奇性}$$

$P_l^m(x)$ の性質

$$\bullet P_l^{-m}(x) = (-1)^m \frac{(l-m)!}{(l+m)!} P_l^m(x)$$

$$\bullet \int_{-1}^1 P_l^m(x) P_l^{m'}(x) dx = \frac{2}{2l+1} \frac{(l+m)!}{(l-m)!} \delta_{ll'} \delta_{mm'}$$

$$\bullet \left((1-x^2) \frac{d^2}{dx^2} - 2x \frac{d}{dx} + l(l+1) - \frac{m^2}{1-x^2} \right) P_l^m(x) = 0 \quad \text{ルジャンドルの陪微分方程式}$$

3.4 スピン角運動量

粒子のスピン角運動量：直観的には粒子の「自転」

- 全角運動量： $\hat{J} = \hat{L} + \hat{S}$, $[\hat{S}, \hat{L}] = 0$
- \hat{S} も角運動量の代数： $[\hat{S}_x, \hat{S}_y] = i\hbar\hat{S}_z, \dots$

\hat{S}^2 の固有値： $\hbar^2 s(s+1)$ s は整数もしくは半整数（粒子によって定まっている）

\hat{S}_z の固有値： $\hbar m$ $m = -s, \dots, s$ ($2s+1$ 個)

★ 電子、陽子、中性子、クォーク、ニュートリノ： $s = \frac{1}{2}$

$s = \frac{1}{2}$ (スピン $\frac{1}{2}$)： $\hat{S}^2 = \hbar^2 \frac{1}{2} (\frac{1}{2} + 1) = \frac{3}{4} \hbar^2$

\hat{S}_z の固有状態： $\hat{S}_z |m\rangle = \hbar m |m\rangle$ $m = \pm \frac{1}{2}$

$|\pm\rangle \equiv |\pm \frac{1}{2}\rangle$ と略すと

$$\hat{S}_+ |+\rangle = 0, \quad \hat{S}_- |+\rangle = \hbar |-\rangle, \quad \hat{S}_+ |-\rangle = \hbar |+\rangle, \quad \hat{S}_- |-\rangle = 0$$

2次元ベクトル表現で

$$|+\rangle \Rightarrow \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |-\rangle \Rightarrow \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

と表わすと

$$\tilde{S}_+ = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \tilde{S}_- = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \tilde{S}_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

よって

$$\tilde{S} = \frac{\hbar}{2} \sigma$$

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad : \text{パウリ行列}$$

一般の量子状態 $|\psi\rangle$ は

$$|\psi\rangle = |+\rangle\psi_+ + |-\rangle\psi_- \Rightarrow \psi = \begin{pmatrix} \psi_+ \\ \psi_- \end{pmatrix} \quad : \text{2成分スピナー}$$

で表わされる。

[問題] $|R\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle + |-\rangle)$ と $|L\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle - |-\rangle)$ が \hat{S}_x の固有状態

$$\hat{S}_x|R\rangle = \frac{\hbar}{2}|R\rangle, \quad \hat{S}_x|L\rangle = -\frac{\hbar}{2}|L\rangle$$

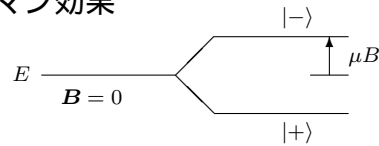
であることを確かめよ。

磁場中の $s = \frac{1}{2}$ 粒子

ハミルトニアン

$$\hat{H} = -\frac{2\mu}{\hbar}\hat{\mathbf{S}} \cdot \mathbf{B} = -\frac{2\mu B}{\hbar}\hat{S}_z \quad \left\{ \begin{array}{l} \mu : \text{スピン磁気モーメント} \\ \mathbf{B} \equiv (0, 0, B) : \text{磁場} \end{array} \right.$$

$$\hat{H}|\pm\rangle = \mp\mu B|\pm\rangle \quad \text{異常ゼーマン効果}$$



• 系の状態 $|\psi(t)\rangle$ が $t=0$ に $|\psi(0)\rangle = |R\rangle$ とすると

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}|R\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\frac{1}{\sqrt{2}}\{|+\rangle + |-\rangle\} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left\{e^{\frac{i}{\hbar}\mu Bt}|+\rangle + e^{-\frac{i}{\hbar}\mu Bt}|-\rangle\right\} \end{aligned}$$

• 時刻 t に状態が $|L\rangle$ である確率振幅は

$$\begin{aligned} \langle L|\psi(t)\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}\{\langle +| - \langle -|\}\frac{1}{\sqrt{2}}\left\{e^{\frac{i}{\hbar}\mu Bt}|+\rangle + e^{-\frac{i}{\hbar}\mu Bt}|-\rangle\right\} \\ &= \frac{1}{2}\left\{e^{\frac{i}{\hbar}\mu Bt} - e^{-\frac{i}{\hbar}\mu Bt}\right\} \\ &= i \sin \frac{\mu Bt}{\hbar} \end{aligned}$$

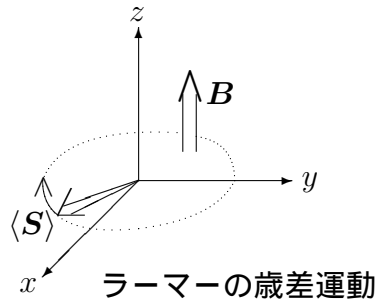
• $|R\rangle$ から $|L\rangle$ への遷移確率 $P_{R \rightarrow L}(t)$ は

$$P_{R \rightarrow L}(t) = |\langle L|\psi(t)\rangle|^2 = \sin^2 \frac{\mu Bt}{\hbar}$$

[問題] 時刻 t における \hat{S} の期待値 $\langle \mathbf{S}(t) \rangle \equiv \langle \psi(t)|\hat{\mathbf{S}}|\psi(t)\rangle$ が

$$\begin{aligned} \langle S_x(t) \rangle &= \frac{\hbar}{2} \cos \frac{2\mu Bt}{\hbar} \\ \langle S_y(t) \rangle &= -\frac{\hbar}{2} \sin \frac{2\mu Bt}{\hbar} \\ \langle S_z(t) \rangle &= 0 \end{aligned}$$

となることを示せ。



[問題] スピン 1 ($s = 1$) の粒子 ($\hat{S}^2 = 2\hbar^2$) の \hat{S}_z の固有状態

$$\hat{S}_z|m\rangle = \hbar m|m\rangle \quad m = 1, 0, -1$$

を 3次元ベクトル表現で

$$|+1\rangle \Rightarrow \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |0\rangle \Rightarrow \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |-1\rangle \Rightarrow \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

と表わすと、スピン行列 \tilde{S} が

$$\tilde{S}_x = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \tilde{S}_y = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}, \quad \tilde{S}_z = \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

で与えられることを示せ。

★ W^\pm 、 Z^0 、光子、グルーオンなど、力を媒介する粒子は $s = 1$ である。

3.5 2個のスピン $\frac{1}{2}$ の合成

• 粒子 a, b のスピン \hat{S}^a, \hat{S}^b の合成スピン

$$\hat{S} = \hat{S}^a + \hat{S}^b$$

• 2粒子共に $s_a = s_b = \frac{1}{2}$ とすると、 \hat{S}_z^a, \hat{S}_z^b の固有状態 $|m_a; m_b\rangle \equiv |\pm\rangle_a |\pm\rangle_b$ は

$$\hat{S}_z = \hat{S}_z^a + \hat{S}_z^b \text{ の固有値 } \begin{cases} +\hbar & : |+\rangle_a |+\rangle_b \\ 0 & : |+\rangle_a |-\rangle_b, |-\rangle_a |+\rangle_b \\ -\hbar & : |-\rangle_a |-\rangle_b \end{cases}$$

- $|+\rangle_a|+\rangle_b$ は \hat{S}_z の最大固有値 $+\hbar$ を持つので、合成スピンの $s = 1$ の固有状態

$$|1, 1\rangle \equiv |+\rangle_a|+\rangle_b, \quad \hat{S}_+|1, 1\rangle = 0$$

- これに順次 \hat{S}_- を作用させると

$$\begin{aligned} \hat{S}_-|1, 1\rangle &= \hbar\sqrt{2}|1, 0\rangle \\ &= (\hat{S}_-^a + \hat{S}_-^b) \{|+\rangle_a|+\rangle_b\} \\ &= \{\hat{S}_-^a|+\rangle_a\} |+\rangle_b + |+\rangle_a \{\hat{S}_-^b|+\rangle_b\} \\ &= \hbar \{|-\rangle_a|+\rangle_b + |+\rangle_a|-\rangle_b\} \end{aligned}$$

$$\therefore |1, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \{|+\rangle_a|-\rangle_b + |-\rangle_a|+\rangle_b\}$$

$$\begin{aligned} \hat{S}_-|1, 0\rangle &= \hbar\sqrt{2}|1, -1\rangle \\ &= (\hat{S}_-^a + \hat{S}_-^b) \frac{1}{\sqrt{2}} \{|+\rangle_a|-\rangle_b + |-\rangle_a|+\rangle_b\} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\{\hat{S}_-^a|+\rangle_a\} |-\rangle_b + |+\rangle_a \{\hat{S}_-^b|-\rangle_b\} + \{\hat{S}_-^a|-\rangle_a\} |+\rangle_b + |-\rangle_a \{\hat{S}_-^b|+\rangle_b\} \right) \\ &= \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \{|-\rangle_a|-\rangle_b + |-\rangle_a|-\rangle_b\} \\ &= \hbar\sqrt{2}|-\rangle_a|-\rangle_b \end{aligned}$$

$$\therefore |1, -1\rangle = |-\rangle_a|-\rangle_b$$

$$\hat{S}_-|1, -1\rangle = 0$$

まとめて

$$\begin{aligned} |1, 1\rangle &= |+\rangle_a|+\rangle_b \\ |1, 0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \{|+\rangle_a|-\rangle_b + |-\rangle_a|+\rangle_b\} \\ |1, -1\rangle &= |-\rangle_a|-\rangle_b \end{aligned}$$

は $s = 1$ の スピン 3 重項 (triplet)

- これらと直交する残りの $\hat{S}_z = 0$ の状態

$$|0, 0\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} \{|+\rangle_a|-\rangle_b - |-\rangle_a|+\rangle_b\}$$

は $s = 0$ の スピン 1 重項 (singlet) で

$$\begin{aligned}\hat{S}_{\pm}|0,0\rangle &= (\hat{S}_{\pm}^a + \hat{S}_{\pm}^b) \frac{1}{\sqrt{2}} \{ |+\rangle_a |-\rangle_b - |-\rangle_a |+\rangle_b \} \\ &= \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \{ |\pm\rangle_a |\pm\rangle_b - |\pm\rangle_a |\pm\rangle_b \} \\ &= 0\end{aligned}$$

スピン・スピン相互作用

- $s_a = s_b = \frac{1}{2}$ の 2 スピン系のハミルトニアンが

$$\hat{H} = \kappa \hat{\mathbf{S}}^a \cdot \hat{\mathbf{S}}^b$$

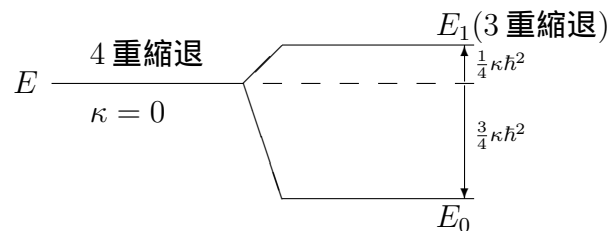
のとき、 $\hat{\mathbf{S}}^2 = (\hat{\mathbf{S}}^a + \hat{\mathbf{S}}^b)^2 = (\hat{\mathbf{S}}^a)^2 + (\hat{\mathbf{S}}^b)^2 + 2\hat{\mathbf{S}}^a \cdot \hat{\mathbf{S}}^b$ により

$$\hat{H} = \frac{\kappa}{2} \left(\hat{\mathbf{S}}^2 - \frac{3}{2}\hbar^2 \right) \quad \because \quad (\hat{\mathbf{S}}^a)^2 = (\hat{\mathbf{S}}^b)^2 = \frac{3}{4}\hbar^2$$

- 合成スピンの状態 $|s, m\rangle$ は \hat{H} の固有状態

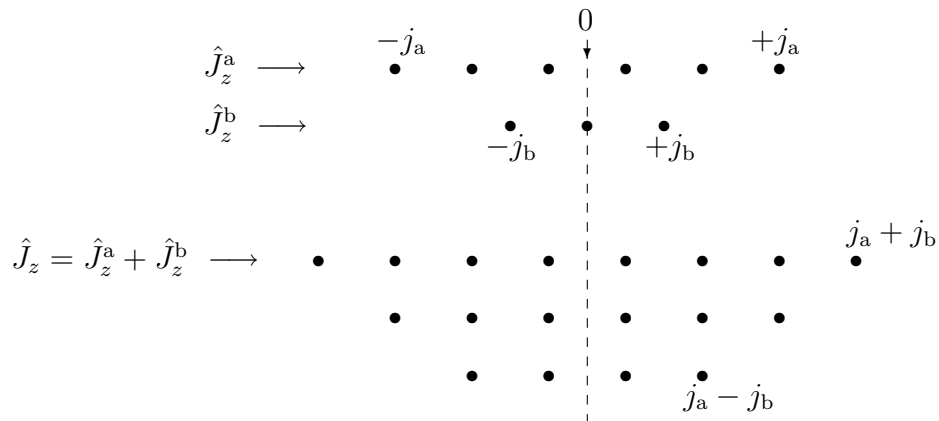
$$\hat{H}|s, m\rangle = E_s |s, m\rangle \quad E_s = \frac{1}{2}\kappa\hbar^2 \left(s(s+1) - \frac{3}{2} \right)$$

$$\therefore \quad E_1(3 \text{ 重項}) = \frac{1}{4}\kappa\hbar^2, \quad E_0(1 \text{ 重項}) = -\frac{3}{4}\kappa\hbar^2$$



3.6 一般の角運動量の合成

$$\begin{array}{ccc} \hat{\mathbf{J}}^a, \hat{\mathbf{J}}^b & \Rightarrow & \hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{J}}^a + \hat{\mathbf{J}}^b & (j_a \geq j_b \text{ とする}) \\ |j_a, m_a\rangle |j_b, m_b\rangle & & |j, m\rangle & \end{array}$$



合成角運動量 j は $j_a - j_b \leq j \leq j_a + j_b$

$$|j, m\rangle = \sum_{m_a, m_b (m_a + m_b = m)} C(j_a j_b j; m_a m_b m) |j_a, m_a\rangle |j_b, m_b\rangle$$

$$|j_a - j_b| \leq j \leq j_a + j_b$$

$C(j_a j_b j; m_a m_b m)$: Clebsch-Gordan 係数

例 $\hat{J} = \hat{L}(l) + \hat{S}(\frac{1}{2})$ の合成 $j = l + \frac{1}{2}, l - \frac{1}{2}$

$$j = l + \frac{1}{2} : |l + \frac{1}{2}, m\rangle = \sqrt{\frac{l + \frac{1}{2} + m}{2l + 1}} |l, m - \frac{1}{2}\rangle |+\rangle + \sqrt{\frac{l + \frac{1}{2} - m}{2l + 1}} |l, m + \frac{1}{2}\rangle |-\rangle$$

$$j = l - \frac{1}{2} : |l - \frac{1}{2}, m\rangle = \sqrt{\frac{l + \frac{1}{2} - m}{2l + 1}} |l, m - \frac{1}{2}\rangle |+\rangle - \sqrt{\frac{l + \frac{1}{2} + m}{2l + 1}} |l, m + \frac{1}{2}\rangle |-\rangle$$

導出は演習問題 (III-7-1) 参照

3.7 ウィグナー・エッカート (Wigner-Eckart) の定理

物理量 \hat{F} が角運動量 $\hat{J} = (\hat{J}_x, \hat{J}_y, \hat{J}_z)$ と可換

$$[\hat{F}, \hat{J}] = 0$$

なとき、 \hat{J} と \hat{J}_z の同時固有状態 $|j, m\rangle$ についての \hat{F} の行列要素は

$$\langle j', m' | \hat{F} | j, m \rangle = f(j) \delta_{j'j} \delta_{m'm}$$

と表わされ、スカラー因子 $f(j)$ は量子数 m に依存しない。(演習問題 (III-7-1) 参照)

応用: 球対称ポテンシャル $V(\hat{x})$ のハミルトニアン $\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{p}^2 + V(\hat{x})$ は \hat{L} と可換である。よって

$$[\hat{H}, \hat{L}] = 0 \quad \Rightarrow \quad \langle l', m' | \hat{H} | l, m \rangle = E(l) \delta_{l', l} \delta_{m', m}$$

即ち、エネルギー固有値は m によらない。

第4章 摂動論

4.1 時間によらない摂動

系のハミルトニアン

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \lambda \hat{V} \quad \left\{ \begin{array}{l} \hat{H}_0 : \text{無摂動ハミルトニアン} \\ \hat{V} : \text{摂動 (時間によらないとする)} \\ \lambda : \text{便宜的な実数パラメーターで最後に } \lambda = 1 \text{ とおく.} \end{array} \right.$$

無摂動系

\hat{H}_0 の固有ベクトル $|E_n\rangle$ は知っているものとする。

$$\hat{H}_0 |E_n\rangle = E_n |E_n\rangle$$

$$\langle E_n | E_m \rangle = \delta_{nm}, \quad \sum_n |E_n\rangle \langle E_n| = \hat{1}$$

\hat{H}_0 を対角にする表示での \hat{H} の行列表現 H

$$(H)_{mn} \equiv H_{mn} = \langle E_m | \hat{H} | E_n \rangle$$

$$H = \underset{\substack{\uparrow \\ H_0}}{E} + \lambda V \quad \left\{ \begin{array}{l} (E)_{mn} = E_m \delta_{mn} \\ (V)_{mn} = V_{mn} \equiv \langle E_m | \hat{V} | E_n \rangle \end{array} \right.$$

H の対角化

ユニタリー行列 : $U \quad UU^\dagger = U^\dagger U = 1$: 単位行列

$$UHU^\dagger = E(\lambda) \quad E(\lambda) : \text{対角行列}$$

$$\sum_{m,n} U_{am} H_{mn} U_{nb}^\dagger = E_a(\lambda) \delta_{ab}$$

$$\sum_m U_{am} U_{mb}^\dagger = \delta_{ab}, \quad \sum_a U_{ma}^\dagger U_{an} = \delta_{mn}$$

- 表示の変換の一般論 (1.3 節) により \hat{H} の固有ベクトル及び固有値は

$$|a\rangle = \sum_n |E_n\rangle U_{na}^\dagger, \quad \hat{H}|a\rangle = E_a(\lambda)|a\rangle$$

である。

復習

$$\begin{aligned} \hat{H}|a\rangle &= \sum_n \hat{H}|E_n\rangle U_{na}^\dagger = \sum_{m,n} |E_m\rangle \langle E_m|\hat{H}|E_n\rangle U_{na}^\dagger \\ &= \sum_{m,n} |E_m\rangle H_{mn} U_{na}^\dagger \\ &= \sum_{m,n,l,b} |E_m\rangle U_{mb}^\dagger U_{bl} H_{ln} U_{na}^\dagger \\ &= \sum_{m,b} |E_m\rangle U_{mb}^\dagger E_b(\lambda) \delta_{ba} \\ &= E_a(\lambda) \sum_m |E_m\rangle U_{ma}^\dagger \\ &= E_a(\lambda)|a\rangle \end{aligned}$$

4.2 摂動展開

$$UHU^\dagger = E(\lambda) \quad \Rightarrow \quad U^\dagger E(\lambda) = HU^\dagger$$

- λ が十分小さいとして $E(\lambda)$ と U^\dagger を

$$E(\lambda) = E^{(0)} + \lambda E^{(1)} + \lambda^2 E^{(2)} + \dots \quad E^{(i)} \ (i = 0, 1, 2, \dots) : \text{対角行列}$$

$$U^\dagger = 1 + \lambda T^{(1)} + \lambda^2 T^{(2)} + \dots$$

と λ でべき展開すると

$$\begin{aligned} (1 + \lambda T^{(1)} + \lambda^2 T^{(2)} + \dots)(E^{(0)} + \lambda E^{(1)} + \lambda^2 E^{(2)} + \dots) \\ = (E + \lambda V)(1 + \lambda T^{(1)} + \lambda^2 T^{(2)} + \dots) \end{aligned}$$

- λ の各べきで等式が成り立つと要請

$$\lambda^0 : E^{(0)} = E$$

$$\lambda^1 : E^{(1)} + T^{(1)}E^{(0)} = ET^{(1)} + V$$

$$\lambda^2 : E^{(2)} + T^{(1)}E^{(1)} + T^{(2)}E^{(0)} = ET^{(2)} + VT^{(1)}$$

• よって

$$E^{(1)} = ET^{(1)} - T^{(1)}E + V$$

$$E^{(2)} = ET^{(2)} - T^{(2)}E - T^{(1)}E^{(1)} + VT^{(1)}$$

• 行列要素

$$E_m^{(1)}\delta_{mn} = E_m T_{mn}^{(1)} - T_{mn}^{(1)}E_n + V_{mn} \quad (4.1)$$

$$E_m^{(2)}\delta_{mn} = E_m T_{mn}^{(2)} - T_{mn}^{(2)}E_n - T_{mn}^{(1)}E_n^{(1)} + \sum_l V_{ml}T_{ln}^{(1)} \quad (4.2)$$

4.3 縮退のない場合の解

\hat{H}_0 に縮退がないとき : $E_m \neq E_n$ for any $m \neq n$

(4.1) 式

$$m = n : E_m^{(1)} = V_{mm}$$

$$m \neq n : T_{mn}^{(1)} = -\frac{V_{mn}}{E_m - E_n}$$

* $T_{mm}^{(1)}$ は未定

(4.2) 式

$$m = n : E^{(2)} = -T_{mm}^{(1)}E_m^{(1)} + \sum_l V_{ml}T_{lm}^{(1)} \quad l = m \text{ は第 1 項とキャンセル}$$

$$= -\sum_{l \neq m} \frac{V_{ml}V_{lm}}{(E_l - E_m)}$$

$$m \neq n : 0 = (E_m - E_n)T_{mn}^{(2)} - T_{mn}^{(1)}E_n^{(1)} + \sum_{l \neq n} V_{ml}T_{ln}^{(1)} + V_{mn}T_{nn}^{(1)}$$

$$T_{mn}^{(2)} = \sum_{l \neq n} \frac{V_{ml}V_{ln}}{(E_m - E_n)(E_l - E_n)} - \frac{V_{mn}V_{nn}}{(E_m - E_n)^2} - \frac{V_{mn}}{E_m - E_n}T_{nn}^{(1)}$$

* $T_{mm}^{(2)}$ は未定

ユニタリティの条件 $UU^\dagger = 1$

$$U^\dagger = 1 + \lambda T^{(1)} + \lambda^2 T^{(2)} + \dots$$

$$U = 1 + \lambda T^{(1)\dagger} + \lambda^2 T^{(2)\dagger} + \dots$$

- 条件式 $(1 + \lambda T^{(1)\dagger} + \lambda^2 T^{(2)\dagger} + \dots)(1 + \lambda T^{(1)} + \lambda^2 T^{(2)} + \dots) = 1$ より

$$\lambda^0 : 1 = 1$$

$$\lambda^1 : T^{(1)} + T^{(1)\dagger} = 0 \quad (4.3)$$

$$\lambda^2 : T^{(2)} + T^{(2)\dagger} + T^{(1)\dagger}T^{(1)} = 0 \quad (4.4)$$

- (4.3), (4.4) の非対角要素は、既に求めた $T_{mn}^{(1)}$, $T_{mn}^{(2)}$ によって満たされている。

対角要素

$$(4.3) : T_{mm}^{(1)} + T_{mm}^{(1)*} = 0$$

$$T_{mm}^{(1)} = i\phi_m^{(1)} \quad \phi_m^{(1)} : \text{任意の実数}$$

$$(4.4) : T_{mm}^{(2)} + T_{mm}^{(2)*} + \sum_{l \neq m} T_{ml}^{(1)\dagger} T_{lm}^{(1)} + T_{mm}^{(1)\dagger} T_{mm}^{(1)} = 0$$

$$2\Re T_{mm}^{(2)} + \sum_{l \neq m} \frac{|V_{lm}|^2}{(E_l - E_m)^2} + (\phi_m^{(1)})^2 = 0$$

$$\Im T_{mm}^{(2)} = \phi_m^{(2)} \quad \phi_m^{(2)} : \text{任意の実数}$$

$$\therefore T_{mm}^{(2)} = -\frac{1}{2} \sum_{l \neq m} \frac{|V_{lm}|^2}{(E_l - E_m)^2} - \frac{1}{2} (\phi_m^{(1)})^2 + i\phi_m^{(2)}$$

- $\phi_m^{(1)}$, $\phi_m^{(2)}$ の任意性の自由度は \hat{H} の固有状態 $|a\rangle$ の位相の自由度

$$|a\rangle \rightarrow |a\rangle e^{i(\lambda\phi_a^{(1)} + \lambda^2\phi_a^{(2)} + \dots)}$$

に対応、 $\phi_n^{(1)} = \phi_n^{(2)} = 0$ とおいてよい。

\hat{H} の固有値および固有ベクトルは

$$E_a(\lambda) = E_a + \lambda \langle E_a | \hat{V} | E_a \rangle - \lambda^2 \sum_{l \neq a} \frac{|\langle E_l | \hat{V} | E_a \rangle|^2}{E_l - E_a} + \mathcal{O}(\lambda^3)$$

$$|a\rangle = |E_a\rangle \left(1 - \lambda^2 \frac{1}{2} \sum_{l \neq a} \frac{|\langle E_l | \hat{V} | E_a \rangle|^2}{(E_l - E_a)^2} + \mathcal{O}(\lambda^4) \right) \\ + \sum_{m \neq a} |E_m\rangle \left\{ -\lambda \frac{\langle E_m | \hat{V} | E_a \rangle}{E_m - E_a} + \lambda^2 \left[\sum_{l \neq a} \frac{\langle E_m | \hat{V} | E_l \rangle \langle E_l | \hat{V} | E_a \rangle}{(E_m - E_a)(E_l - E_a)} \right. \right. \\ \left. \left. - \frac{\langle E_m | \hat{V} | E_a \rangle \langle E_a | \hat{V} | E_a \rangle}{(E_m - E_a)^2} \right] + \mathcal{O}(\lambda^3) \right\}$$

Rayleigh-Schrödinger の摂動公式

4.4 縮退がある場合

$$\hat{H}_0 \text{ に縮退} : E_m = E_n \quad \text{for } m \neq n$$

4.2 節の (4.1) 式 : $0 = V_{mn} (\neq 0)$ おかしい!! \Rightarrow どうする?

注目 : \hat{H}_0 の固有ベクトル $|E_m\rangle$ に不定性

$$\hat{H}_0 |E_m\rangle = E(\alpha) |E_m\rangle \quad m \in \{\alpha\} : \text{縮退している空間}$$

$$\hat{H}_0 \left[\sum_{m \in \{\alpha\}} |E_m\rangle c_m \right] = E(\alpha) \left[\sum_{m \in \{\alpha\}} |E_m\rangle c_m \right]$$

この自由度を使って $V_{mn} = \langle E_m | \hat{V} | E_n \rangle$ が $\{\alpha\}$ 空間の中で対角

$$V_{mm'} = V_m(\alpha) \delta_{mm'} \quad m, m' \in \{\alpha\}$$

となるように \hat{H}_0 の固有ベクトル $|E_m\rangle$ を選ぶ。行列で書くと

$$E = \left(\begin{array}{ccc|ccc} \cdot & & 0 & & & \\ & E(\alpha) & & 0 & & \\ \hline 0 & \cdot & & & 0 & \\ & & & \cdot & & 0 \\ & 0 & & E(\beta) & & \\ \hline & & 0 & & \cdot & \\ 0 & & & 0 & & \cdot \end{array} \right) \quad V = \left(\begin{array}{ccc|ccc} \cdot & & 0 & & & \\ & V_m(\alpha) & & V_{mn} & & * \\ \hline 0 & \cdot & & & 0 & \\ & & & \cdot & & \\ & V_{nm} & & V_n(\beta) & & * \\ \hline & & 0 & & \cdot & \\ * & & & * & & \cdot \end{array} \right)$$

4.2 節の (4.1) 式

$$E_m^{(1)} \delta_{mn} = E_m T_{mn}^{(1)} - T_{mn}^{(1)} E_n + V_{mn}$$

$$[m = n] \in \{\alpha\} : E_m^{(1)} = V_{mm} = V_m(\alpha)$$

$$[m \neq n] \in \{\alpha\} : 0 = 0$$

$$m \in \{\alpha\}, n \in \{\beta\} : 0 = (E_m - E_n) T_{mn}^{(1)} + V_{mn}$$

$$T_{mn}^{(1)} = -\frac{V_{mn}}{E_m - E_n}$$

4.2 節の (4.2) 式

$$E_m^{(2)} \delta_{mn} = E_m T_{mn}^{(2)} - T_{mn}^{(2)} E_n - T_{mn}^{(1)} E_n^{(1)} + \sum_l V_{ml} T_{ln}^{(1)}$$

$$\begin{aligned}
[m = n] \in \{\alpha\} : E_m^{(2)} &= -T_{mm}^{(1)} E_m^{(1)} + \sum_l V_{ml} T_{lm}^{(1)} \\
&= - \sum_{l \notin \{\alpha\}} \frac{V_{ml} V_{lm}}{E_l - E_m} \\
[m \neq n] \in \{\alpha\} : 0 &= -T_{mn}^{(1)} E_n^{(1)} + \sum_{l \notin \{\alpha\}} V_{ml} T_{ln}^{(1)} + V_{mm} T_{mn}^{(1)} \\
&= (V_m(\alpha) - V_n(\alpha)) T_{mn}^{(1)} - \sum_{l \notin \{\alpha\}} \frac{V_{ml} V_{ln}}{E_l - E_n}
\end{aligned}$$

摂動の1次で縮退が解け $V_m(\alpha) \neq V_n(\alpha)$ のときは

$$T_{mn}^{(1)} = \frac{1}{V_m(\alpha) - V_n(\alpha)} \sum_{l \notin \alpha} \frac{V_{ml} V_{ln}}{E_l - E_n}$$

$m \in \{\alpha\}, n \in \{\beta\}$ を解けば $T_{mn}^{(2)}$ も求まる。

• 縮退が解けず $V_m(\alpha) = V_n(\alpha)$ のときは

$$W_{mn} \equiv \sum_{l \notin \{\alpha\}} \frac{V_{ml} V_{ln}}{E_l - E_n}$$

を対角化するように $|E_m\rangle$ を決めて先に進む。

まとめ

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \lambda \hat{V}, \quad \hat{H}_0 |E_a\rangle = E_a |E_a\rangle$$

• E_a に縮退がない場合

$$E_a(\lambda) = E_a + \lambda \langle E_a | \hat{V} | E_a \rangle - \lambda^2 \sum_{l \neq a} \frac{|\langle E_a | \hat{V} | E_l \rangle|^2}{E_l - E_a} + \mathcal{O}(\lambda^3)$$

• E_a が空間 $\{\alpha\}$ で縮退している場合

$\langle E_a | \hat{V} | E_b \rangle$ ($a, b \in \{\alpha\}$) が対角行列になるように $|E_a\rangle$ ($a \in \{\alpha\}$) をとって

$$E_a(\lambda) = E_a + \lambda \langle E_a | \hat{V} | E_a \rangle - \lambda^2 \sum_{l \notin \{\alpha\}} \frac{|\langle E_l | \hat{V} | E_a \rangle|^2}{E_l - E_a} + \mathcal{O}(\lambda^3)$$

4.5 時間による摂動

摂動 \hat{V} が時刻 t に依存して変動している系

$$\begin{aligned}
\hat{H}(t) &= \hat{H}_0 + \lambda \hat{V}(t) \\
i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle &= (\hat{H}_0 + \lambda \hat{V}(t)) |\psi(t)\rangle
\end{aligned}$$

- 無摂動系の固有ベクトル

$$\hat{H}_0|E_n\rangle = E_n|E_n\rangle$$

で状態 $|\psi(t)\rangle$ を展開

$$|\psi(t)\rangle = \sum_l |E_l\rangle c_l(t) \frac{e^{-\frac{i}{\hbar}E_l t}}{\hat{H}_0 \text{ の効果を出しておく}}$$

$$c_l(t) = e^{\frac{i}{\hbar}E_l t} \langle E_l|\psi(t)\rangle$$

- シュレディンガー方程式は

$$i\hbar \frac{d}{dt} c_l(t) = -E_l c_l(t) + e^{\frac{i}{\hbar}E_l t} \langle E_l| i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle$$

$$= -E_l c_l(t) + e^{\frac{i}{\hbar}E_l t} \langle E_l| \left(\underset{\downarrow E_l}{\hat{H}_0} + \lambda \hat{V}(t) \right) \sum_m |E_m\rangle c_m(t) e^{-\frac{i}{\hbar}E_m t}$$

すなわち

$$i\hbar \frac{d}{dt} c_l(t) = \lambda \sum_m e^{\frac{i}{\hbar}(E_l - E_m)t} \langle E_l|\hat{V}(t)|E_m\rangle c_m(t)$$

摂動展開

$c_l(t)$ を λ のべきで摂動展開

$$c_l(t) = c_l^{(0)} + \lambda c_l^{(1)}(t) + \lambda^2 c_l^{(2)}(t) + \lambda^3 c_l^{(3)}(t) + \dots \quad : c_l^{(0)} \text{ は } t \text{ によらない}$$

- 運動方程式に代入し λ^k の項をぬきだすと

$$i\hbar \frac{d}{dt} c_l^{(k)}(t) = \sum_m e^{\frac{i}{\hbar}(E_l - E_m)t} \langle E_l|\hat{V}(t)|E_m\rangle c_m^{(k-1)}(t)$$

- $t = 0$ の初期条件 $c_l(0) = c_l^{(0)}$, $c_l^{(k \geq 1)}(0) = 0$ のもとに積分

$$c_l^{(k)}(t) = \sum_m \int_0^t \frac{dt_1}{i\hbar} e^{\frac{i}{\hbar}(E_l - E_m)t_1} \langle E_l|\hat{V}(t_1)|E_m\rangle c_m^{(k-1)}(t_1) \quad (k \geq 1)$$

- この式を繰り返して使うことにより、摂動の高次の振幅が順次

$$c_l(0) \rightarrow c_l^{(1)}(t) \rightarrow c_l^{(2)}(t) \rightarrow c_l^{(3)}(t) \rightarrow \dots$$

と求まる。

- 摂動の1次の振幅は

$$\lambda c_l^{(1)}(t) = \lambda \sum_m \int_0^t \frac{dt_1}{i\hbar} e^{\frac{i}{\hbar}(E_l - E_m)t_1} \langle E_l|\hat{V}(t_1)|E_m\rangle c_m(0)$$

- 時刻 $t = 0$ に $|\psi(0)\rangle = |E_i\rangle$ ($c_l(0) = \delta_{li}$)、時刻 t に $|E_f\rangle$ である確率振幅は摂動の1次で

$$c_f(t) = \lambda \int_0^t \frac{dt_1}{i\hbar} e^{\frac{i}{\hbar}(E_f - E_i)t_1} \langle E_f | \hat{V}(t_1) | E_i \rangle$$

遷移確率は

$$P_{fi}(t) = |\langle E_f | \psi(t) \rangle|^2 = |c_f(t)|^2$$

簡単な例

$$\hat{V}(t) = \begin{cases} 0 & t < 0 \\ \hat{V} & t \geq 0 \end{cases}$$

のとき、摂動の1次は

$$\begin{aligned} \lambda c_f^{(1)}(t) &= \lambda \int_0^t \frac{dt_1}{i\hbar} e^{\frac{i}{\hbar}(E_f - E_i)t_1} \langle E_f | \hat{V} | E_i \rangle \\ &= -\lambda \frac{e^{\frac{i}{\hbar}(E_f - E_i)t} - 1}{E_f - E_i} \langle E_f | \hat{V} | E_i \rangle \end{aligned}$$

遷移確率は

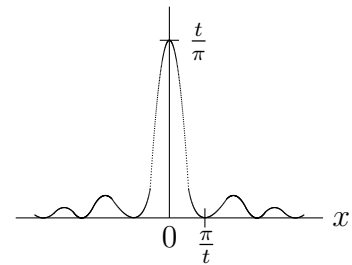
$$P_{fi}(t) = \lambda^2 \left(\frac{2 \sin \frac{t}{2\hbar}(E_f - E_i)}{E_f - E_i} \right)^2 |\langle E_f | \hat{V} | E_i \rangle|^2$$

δ 関数の公式

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\sin^2 tx}{\pi tx^2} = \delta(x)$$

により、単位時間当りの遷移確率は

$$w_{fi} \equiv \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} P_{fi}(t) = \lambda^2 \frac{2\pi}{\hbar} |\langle E_f | \hat{V} | E_i \rangle|^2 \delta(E_f - E_i)$$

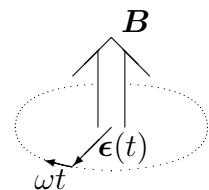


フェルミの黄金律

4.6 スピン磁気共鳴 ($s = \frac{1}{2}$)

定磁場 $B = (0, 0, B)$ と振動磁場 $\epsilon(t) = (\epsilon \cos \omega t, -\epsilon \sin \omega t, 0)$ の中の $s = \frac{1}{2}$ のスピン

$$\begin{aligned} \hat{H} &= -\frac{2\mu}{\hbar} \hat{S} \cdot B - \frac{2\mu}{\hbar} \hat{S} \cdot \epsilon(t) \\ &= -A \hat{S}_z - a (\hat{S}_+ e^{i\omega t} + \hat{S}_- e^{-i\omega t}) \\ &\equiv \hat{H}_0 + \hat{V}(t) \end{aligned}$$



$$\begin{cases} A = \frac{2\mu B}{\hbar} & \text{ラーマー周波数} \\ a = \frac{\mu\epsilon}{\hbar} \end{cases}$$

\hat{H}_0 の固有ベクトル $|\pm\rangle$

$$\hat{H}_0|\pm\rangle = \mp\hbar\frac{A}{2}|\pm\rangle$$

$\hat{V}(t)$ の 0 でない行列要素

$$\langle -|\hat{V}(t)|+\rangle = -\hbar a e^{-i\omega t}, \quad \langle +|\hat{V}(t)|-\rangle = -\hbar a e^{i\omega t}$$

摂動の最低次

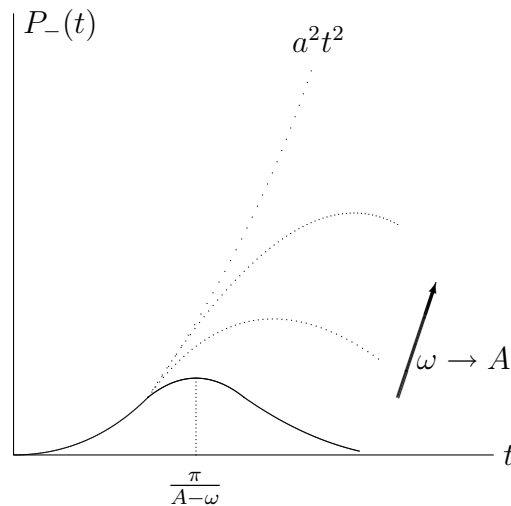
$t = 0$ に $|\psi(0)\rangle = |+\rangle$ で t に $|-\rangle$ の確率振幅

$$\begin{aligned} c_-(t) &= \int_0^t \frac{dt_1}{i\hbar} e^{iAt_1} (-\hbar a) e^{-i\omega t_1} \\ &= i a e^{i\frac{A-\omega}{2}t} \frac{\sin \frac{A-\omega}{2}t}{\frac{A-\omega}{2}} \end{aligned}$$

遷移確率は

$$P_-(t) \equiv |c_-(t)|^2 = a^2 \frac{\sin^2 \frac{A-\omega}{2}t}{\left(\frac{A-\omega}{2}\right)^2}$$

- 摂動磁場の周波数 ω がスピン歳差運動のラーマー周波数 A に近づくと共鳴が起きる。

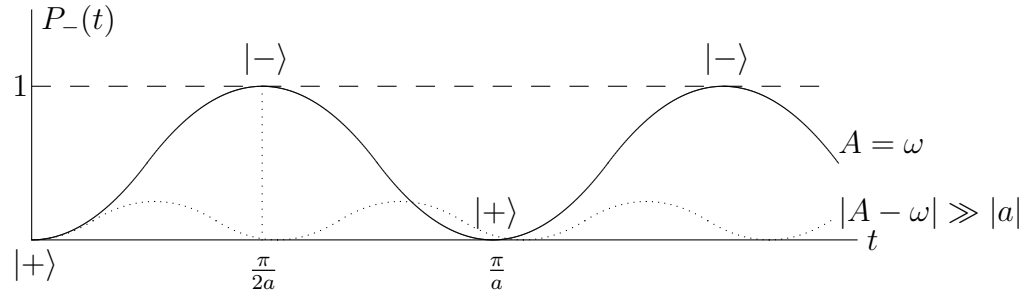


$$P_-(t) \underset{\omega \rightarrow A}{\sim} a^2 t^2 \quad \Rightarrow \quad t \ll \frac{1}{a} \text{ でしか信頼できない。}$$

- 厳密解 : 演習問題 (IV-6-1) 参照

$$c_-(t) = i \frac{a}{\sqrt{a^2 + \left(\frac{A-\omega}{2}\right)^2}} e^{i\frac{A-\omega}{2}t} \sin \sqrt{a^2 + \left(\frac{A-\omega}{2}\right)^2} t$$

$$P_-(t) = \frac{a^2}{a^2 + \left(\frac{A-\omega}{2}\right)^2} \sin^2 \sqrt{a^2 + \left(\frac{A-\omega}{2}\right)^2} t \quad \text{ラビの公式}$$



共鳴点 $\omega \rightarrow A$ では

$$P_-(t) = \sin^2 at$$

4.7 相互作用描像

これまでもちいてきた時刻 t における状態ベクトル $|\psi(t)\rangle$ を、シュレディンガー描像であることを明示して $|\psi(t)\rangle_S$ と表わす。相互作用描像の状態ベクトルを

$$|\psi(t)\rangle_I \equiv e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t} |\psi(t)\rangle_S$$

I : 相互作用描像

S : シュレディンガー描像

で定義すると、4.5 節の $c_l(t)$ との間に

$$\langle E_l | \psi(t) \rangle_I = \langle E_l | e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t} | \psi(t) \rangle_S = e^{\frac{i}{\hbar}E_l t} \langle E_l | \psi(t) \rangle_S = c_l(t)$$

が成り立つ。任意の物理量演算子 (一般に時間変動していてもよい) $\hat{F} \equiv \hat{F}_S(t)$ の時刻 t における期待値は

$$\langle F(t) \rangle = {}_S \langle \psi(t) | \hat{F}_S(t) | \psi(t) \rangle_S = {}_I \langle \psi(t) | \hat{F}_I(t) | \psi(t) \rangle_I$$

ここに

$$\hat{F}_I(t) \equiv e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t} \hat{F}_S(t) e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t}$$

は相互作用描像の演算子。 \hat{H}_0 が解けるハミルトニアンであれば $\hat{F}_I(t)$ の具体的な形は求まる。

• $|\psi(t)\rangle_I$ の運動方程式は

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle_I &= e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t} \left(-\hat{H}_0 + i\hbar \frac{d}{dt} \right) |\psi(t)\rangle_S \\ &= e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t} \left(-\hat{H}_0 + \hat{H}_0 + \lambda \hat{V}_S(t) \right) |\psi(t)\rangle_S \\ &\quad \underbrace{e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t} e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t}} \end{aligned}$$

したがって

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle_I = \lambda \hat{V}_I(t) |\psi(t)\rangle_I$$

★ 状態 $|\psi(t)\rangle_I$ は相互作用 $\hat{V}_I(t)$ によって運動

★ 演算子 $\hat{F}_I(t)$ は \hat{H}_0 によって運動

運動方程式を t で積分

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle_I &= |\psi(t_0)\rangle_I + \frac{\lambda}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt_1 \hat{V}_I(t_1) |\psi(t_1)\rangle_I \\ &= |\psi(t_0)\rangle_I + \frac{\lambda}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt_1 \hat{V}_I(t_1) |\psi(t_0)\rangle_I \\ &\quad + \left(\frac{\lambda}{i\hbar}\right)^2 \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \hat{V}_I(t_1) \hat{V}_I(t_2) |\psi(t_0)\rangle_I + \dots \end{aligned}$$

• 時間推進の演算子を

$$|\psi(t)\rangle_I = \hat{U}(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle_I$$

で定義すると

$$\begin{aligned} \hat{U}(t, t_0) &= \hat{1} + \frac{\lambda}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt_1 \hat{V}_I(t_1) + \left(\frac{\lambda}{i\hbar}\right)^2 \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \hat{V}_I(t_1) \hat{V}_I(t_2) + \dots \\ &= \hat{1} + \sum_{k=1}^{\infty} \left(\frac{\lambda}{i\hbar}\right)^k \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \dots \int_{t_0}^{t_{k-1}} dt_k \hat{V}_I(t_1) \dots \hat{V}_I(t_k) \end{aligned}$$

$\hat{U}(t, t_0)$ のユニタリー性

• $|\psi(t)\rangle_I = \hat{U}(t, t') |\psi(t')\rangle_I = \hat{U}(t, t') \hat{U}(t', t_0) |\psi(t_0)\rangle_I$ により

$$\hat{U}(t, t') \hat{U}(t', t_0) = \hat{U}(t, t_0)$$

$$\hat{U}(t, t) = \hat{1}$$

$$\therefore \hat{U}(t', t) = \hat{U}(t, t')^{-1}$$

• $\hat{V}_I(t)$ のエルミート性 $\hat{V}_I^\dagger = \hat{V}_I$ により

$$\begin{aligned} \hat{U}(t, t_0)^\dagger &= \hat{1} + \sum_{k=1}^{\infty} \left(-\frac{\lambda}{i\hbar}\right)^k \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \dots \int_{t_0}^{t_{k-1}} dt_k \hat{V}_I(t_k) \dots \hat{V}_I(t_1) \\ &= \hat{1} + \sum_{k=1}^{\infty} \left(\frac{\lambda}{i\hbar}\right)^k \int_t^{t_0} dt_1 \int_{t_1}^{t_0} dt_2 \dots \int_{t_{k-1}}^{t_0} dt_k \hat{V}_I(t_k) \dots \hat{V}_I(t_1) \end{aligned}$$

積分領域は $t < t_1 < \cdots < t_k < t_0$ だから

$$\int_t^{t_0} dt_1 \int_{t_1}^{t_0} dt_2 \cdots \int_{t_{k-1}}^{t_0} dt_k = \int_t^{t_0} dt_k \int_t^{t_k} dt_{k-1} \cdots \int_t^{t_2} dt_1$$

よって、 $t_i \rightarrow t_{k-i+1}$ と変数変換して

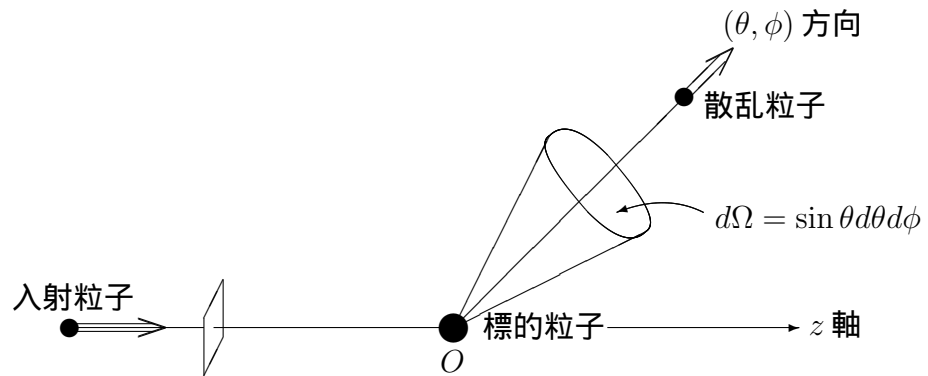
$$\begin{aligned} \hat{U}(t, t_0)^\dagger &= \hat{1} + \sum_{k=1}^{\infty} \left(\frac{\lambda}{i\hbar} \right)^k \int_t^{t_0} dt_1 \int_t^{t_1} dt_2 \cdots \int_t^{t_{k-1}} dt_k \hat{V}_1(t_1) \cdots \hat{V}_1(t_k) \\ &= \hat{U}(t_0, t) \end{aligned}$$

すなわち $\hat{U}(t, t_0)$ はユニタリー演算子

$$\hat{U}(t, t_0)^\dagger = \hat{U}(t_0, t) = \hat{U}(t, t_0)^{-1} \quad \hat{U}(t, t_0)^\dagger \hat{U}(t, t_0) = \hat{U}(t, t_0) \hat{U}(t, t_0)^\dagger = \hat{1}$$

第5章 散乱理論

5.1 散乱断面積と散乱振幅



散乱断面積 $\frac{d\sigma}{d\Omega}$

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}(\theta, \phi) = \frac{[(\theta, \phi) \text{ 方向の立体角 } d\Omega \text{ の中に散乱された粒子数}] / d\Omega}{[\text{標的に向かって入射させた単位断面積当りの粒子数}]}$$

散乱を表現する波動関数

- シュレディンガー方程式の定常状態

$$\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle \quad E = \frac{p^2}{2m} : \text{入射エネルギー}$$

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{\mathbf{p}}^2 + V(\hat{\mathbf{x}})$$

入射粒子と標的粒子の相互作用

- 波動関数: $\psi(\mathbf{x}) = \langle \mathbf{x} | \psi \rangle$

$$\left(\frac{1}{2m}\tilde{\mathbf{p}}^2 + V(\mathbf{x}) \right) \psi(\mathbf{x}) = \frac{p^2}{2m}\psi(\mathbf{x}) \quad ; \quad \tilde{\mathbf{p}} \equiv -i\hbar\nabla$$


- $|\mathbf{x}| > R$ で $V(\mathbf{x}) = 0$ とする。 R : 力のレンジ

自由粒子として入射し、自由粒子として飛び去る

- $|\mathbf{x}| > R$ で

$$\tilde{\mathbf{p}}^2\psi(\mathbf{x}) = p^2\psi(\mathbf{x})$$

平面波解

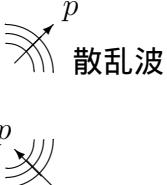
$$\psi(\mathbf{x}) \propto e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}} \quad (\mathbf{p}^2 \equiv p^2)$$


球面波解

$$\tilde{\mathbf{p}}^2 = -\hbar^2 \nabla^2 = -\hbar^2 \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{1}{r^2} \tilde{\mathbf{L}}^2$$

$r \rightarrow \infty$ できく項

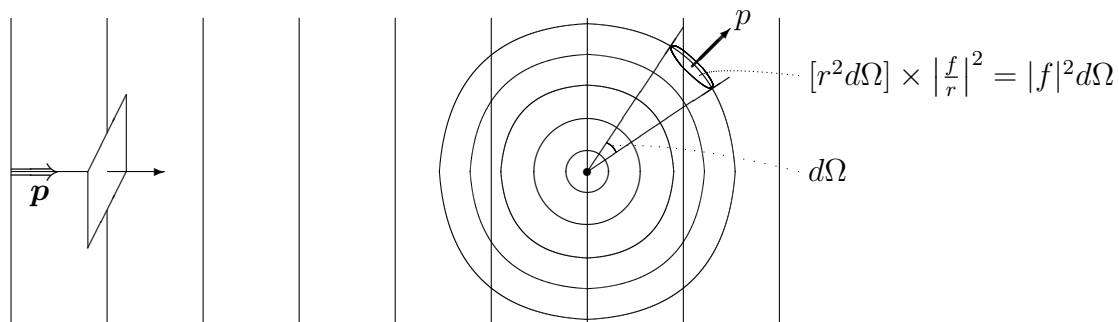
$$-\frac{d^2}{dr^2}(r\psi) \underset{r \rightarrow \infty}{\simeq} \left(\frac{p}{\hbar}\right)^2 r\psi$$

$$\psi \propto \begin{cases} \frac{1}{r} e^{\frac{i}{\hbar}pr} & \text{外向き球面波} \\ \frac{1}{r} e^{-\frac{i}{\hbar}pr} & \text{内向き球面波} \end{cases}$$


散乱の境界条件

$$\psi(\mathbf{x}) \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}} + f(\theta, \phi) \frac{e^{\frac{i}{\hbar}pr}}{r}$$

入射波 散乱波



$f(\theta, \phi)$: 散乱振幅

$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta, \phi)|^2$: 散乱断面積

5.2 リップマン・シュヴィンガー方程式

シュレディンガー方程式を下式のように書く

$$(p^2 - \tilde{p}^2)\psi(\mathbf{x}) = 2mV(\mathbf{x})\psi(\mathbf{x}) \quad \tilde{p} \equiv -i\hbar\nabla \quad (1)$$

- この解で

$$\psi(\mathbf{x}) \underset{|\mathbf{x}| \rightarrow \infty}{\sim} e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}} + f(\theta, \phi) \frac{e^{\frac{i}{\hbar}pr}}{r}$$

となるものを求めたい。

- 入射粒子の平面波は

$$(p^2 - \tilde{p}^2)e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}} = 0$$

- $(p^2 - \tilde{p}^2)$ のグリーン関数 $G(\mathbf{x} - \mathbf{y})$

$$(p^2 - \tilde{p}^2)G(\mathbf{x} - \mathbf{y}) = \delta^3(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \quad \tilde{p} \equiv -i\hbar\frac{\partial}{\partial\mathbf{x}}$$

をもちいると (1) の解は形式的に

$$\psi(\mathbf{x}) = e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}} + \int d^3\mathbf{y} G(\mathbf{x} - \mathbf{y})2mV(\mathbf{y})\psi(\mathbf{y})$$

と表わされる。

$$\begin{aligned} \therefore (p^2 - \tilde{p}^2)\psi(\mathbf{x}) &= \underbrace{(p^2 - \tilde{p}^2)e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}}}_{=0} + \int d^3\mathbf{y} \underbrace{(p^2 - \tilde{p}^2)G(\mathbf{x} - \mathbf{y})}_{=\delta^3(\mathbf{x} - \mathbf{y})}2mV(\mathbf{y})\psi(\mathbf{y}) \\ &= 2mV(\mathbf{x})\psi(\mathbf{x}) \end{aligned}$$

グリーン関数

$$G(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \equiv \int \frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi\hbar)^3} g(\mathbf{k}) e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{k}\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{y})}$$

とおくと

$$\begin{aligned} (p^2 - \tilde{p}^2)G(\mathbf{x} - \mathbf{y}) &= \int \frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi\hbar)^3} g(\mathbf{k})(p^2 - \mathbf{k}^2) e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{k}\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{y})} \\ \delta^3(\mathbf{x} - \mathbf{y}) &= \int \frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi\hbar)^3} e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{k}\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{y})} \end{aligned}$$

よって

$$g(\mathbf{k})(p^2 - \mathbf{k}^2) = 1 \quad \Rightarrow \quad g(\mathbf{k}) = \frac{1}{p^2 - \mathbf{k}^2} \quad \Rightarrow \quad g^{(\pm)}(\mathbf{k}) = \lim_{\epsilon \rightarrow +0} \frac{1}{p^2 - \mathbf{k}^2 \pm i\epsilon}$$

$$G^{(\pm)}(\mathbf{x} - \mathbf{y}) = \int \frac{d^3 \mathbf{k}}{(2\pi\hbar)^3} \frac{1}{p^2 - \mathbf{k}^2 \pm i\epsilon} e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{k} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{y})}$$

積分を実行すると (演習問題 V-2-1 参照)

$$G^{(\pm)}(\mathbf{x} - \mathbf{y}) = -\frac{1}{4\pi\hbar^2} \frac{1}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|} e^{\pm i\frac{p}{\hbar} |\mathbf{x} - \mathbf{y}|} \quad \left. \begin{array}{l} + : \text{外向き} \\ - : \text{内向き} \end{array} \right\} \text{球面波}$$

波動関数は

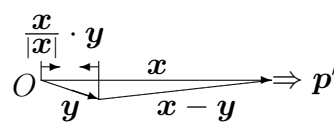
$$\psi^{(+)}(\mathbf{x}) = e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot \mathbf{x}} + \int d^3 \mathbf{y} \underbrace{G^{(+)}(\mathbf{x} - \mathbf{y})}_{\mathbf{y} \text{ から外向き球面波}} \underbrace{2mV(\mathbf{y})}_{\mathbf{y} \text{ に波源}} \psi^{(+)}(\mathbf{y})$$

リップマン・シュヴィンガー方程式

* 状態ベクトルで書くと

$$|\psi^{(+)}\rangle = |\mathbf{p}\rangle + \frac{1}{p^2 - \hat{\mathbf{p}}^2 + i\epsilon} 2m\hat{V}|\psi^{(+)}\rangle$$

• $|\mathbf{x}| \gg |\mathbf{y}|$ で

$$\begin{aligned} p|\mathbf{x} - \mathbf{y}| &\cong p \left(|\mathbf{x}| - \frac{\mathbf{x}}{|\mathbf{x}|} \cdot \mathbf{y} \right) \\ &= pr - \mathbf{p}' \cdot \mathbf{y} \quad ; \quad \mathbf{p}' \equiv p \frac{\mathbf{x}}{|\mathbf{x}|} \end{aligned}$$


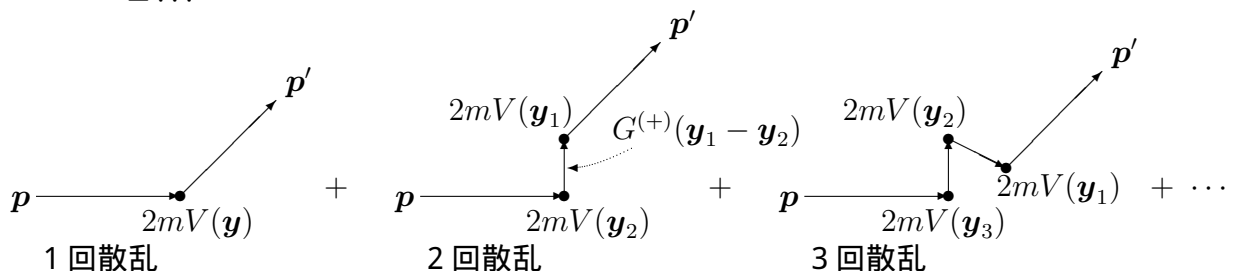
$$G^{(+)}(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \cong -\frac{1}{4\pi\hbar^2} \frac{e^{\frac{i}{\hbar} pr}}{r} e^{-\frac{i}{\hbar} \mathbf{p}' \cdot \mathbf{y}}$$

よって

$$\psi^{(+)}(\mathbf{x}) \underset{r \rightarrow \infty}{\cong} e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot \mathbf{x}} - \frac{e^{\frac{i}{\hbar} pr}}{r} \cdot \frac{1}{4\pi\hbar^2} \int d^3 \mathbf{y} e^{-\frac{i}{\hbar} \mathbf{p}' \cdot \mathbf{y}} 2mV(\mathbf{y}) \psi^{(+)}(\mathbf{y})$$

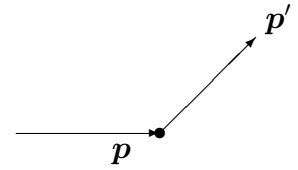
散乱振幅は

$$\begin{aligned} f(\mathbf{p}', \mathbf{p}) &= -\frac{1}{4\pi\hbar^2} \int d^3 \mathbf{y} e^{-\frac{i}{\hbar} \mathbf{p}' \cdot \mathbf{y}} 2mV(\mathbf{y}) \psi^{(+)}(\mathbf{y}) \\ &= -\frac{1}{4\pi\hbar^2} \int d^3 \mathbf{y} e^{-\frac{i}{\hbar} \mathbf{p}' \cdot \mathbf{y}} 2mV(\mathbf{y}) e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot \mathbf{y}} \\ &\quad - \frac{1}{4\pi\hbar^2} \int d^3 \mathbf{y}_1 e^{-\frac{i}{\hbar} \mathbf{p}' \cdot \mathbf{y}_1} 2mV(\mathbf{y}_1) \int d^3 \mathbf{y}_2 G^{(+)}(\mathbf{y}_1 - \mathbf{y}_2) 2mV(\mathbf{y}_2) e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot \mathbf{y}_2} \\ &\quad - \dots \end{aligned}$$



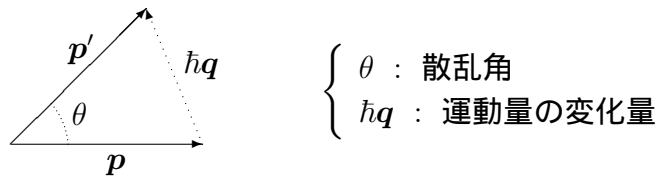
5.3 ボルン近似

- 1 回散乱のみの近似



$$\begin{aligned} f^{(B)}(\mathbf{p}', \mathbf{p}) &= -\frac{2m}{4\pi\hbar^2} \int d^3\mathbf{y} e^{-\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}'-\mathbf{p})\cdot\mathbf{y}} V(\mathbf{y}) \\ &= -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3\mathbf{y} e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{y}} V(\mathbf{y}) \quad ; \quad \mathbf{q} \equiv \frac{1}{\hbar}(\mathbf{p}' - \mathbf{p}) \end{aligned}$$

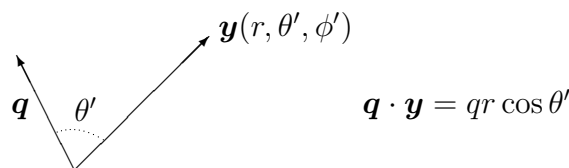
★ ボルン近似の散乱振幅はポテンシャル $V(\mathbf{y})$ の \mathbf{q} についてのフーリエ変換



$$p \sin \frac{\theta}{2} = \frac{1}{2} \hbar q \quad (p \equiv |\mathbf{p}| = |\mathbf{p}'|, q \equiv |\mathbf{q}|) \quad \therefore \quad q = \frac{2p}{\hbar} \sin \frac{\theta}{2}$$

- 球対称ポテンシャル $V(r)$ の場合 $f^{(B)}$ は q の関数

\mathbf{q} を z 軸として \mathbf{y} を極座標 $\mathbf{y} = (r, \theta', \phi')$ で表わすと



$$\begin{aligned} f^{(B)}(q) &= -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int_0^\infty r^2 dr \int_0^{2\pi} d\phi' \int_{-1}^1 d\cos \theta' e^{-iqr \cos \theta'} V(r) \\ &= -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \cdot 2\pi \int_0^\infty r^2 dr \frac{e^{-iqr} - e^{iqr}}{-iqr} V(r) \\ &= -\frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{q} \int_0^\infty r dr V(r) \sin qr \end{aligned}$$

湯川ポテンシャル

$$V(r) = -V_0 \frac{e^{-\mu r}}{r} \quad m = \frac{\hbar}{c} \mu : \text{力を伝える粒子の質量}$$

$$\begin{cases} \text{光子} & m = 0 \\ \pi\text{メソン} & m = 140\text{MeV}/c^2 \end{cases}$$

積分公式

$$\int_0^\infty dx e^{-ax} \sin bx = \frac{b}{a^2 + b^2}$$

により

$$\begin{aligned} f^{(B)} &= -\frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{q} (-V_0) \int_0^\infty dr e^{-\mu r} \sin qr \\ &= \frac{2mV_0}{\hbar^2} \frac{1}{\mu^2 + q^2} \end{aligned}$$

• 微分断面積

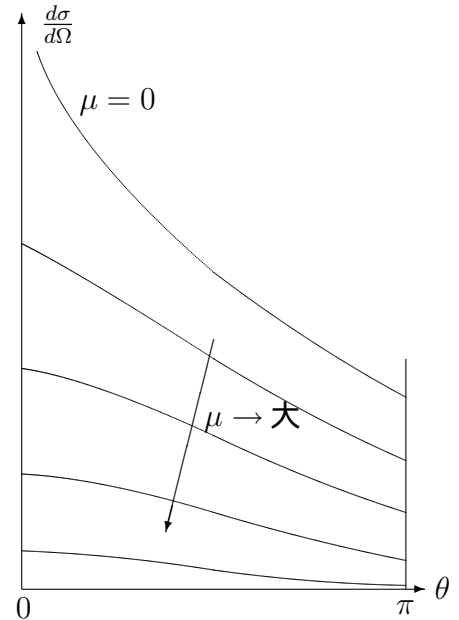
$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{2mV_0}{\hbar^2} \right)^2 \frac{1}{\left[\mu^2 + \frac{4p^2}{\hbar^2} \sin^2 \frac{\theta}{2} \right]^2}$$

• 全散乱断面積

$$\sigma_{\text{Tot}} = \int \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega = \left(\frac{2mV_0}{\hbar^2} \right)^2 \frac{4\pi}{\mu^2 \left(\mu^2 + \frac{4}{\hbar^2} p^2 \right)}$$

• $V_0 \equiv \frac{e^2}{4\pi}$ として $\mu \rightarrow 0$ とするとクーロンポテンシャル

$\frac{d\sigma}{d\Omega}$ は前方 $\theta = 0$ に鋭いピーク
 σ_{Tot} は発散 } ラザフォード散乱



5.4 部分波展開

• 球対称ポテンシャルの場合 $[\hat{x}^2, \hat{L}] = 0$ だから、軌道角運動量は

$$[\hat{H}, \hat{L}] = 0 \quad \Rightarrow \quad \hat{L} \text{ は保存量}$$

$\hat{H}, \hat{L}^2, \hat{L}_z$ の同時固有状態 $|E, l, m\rangle$ が存在。

• \hat{L} の表現論 (3.3 節) により

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{x} | E, l, m \rangle &= R_{lm}(r) Y_l^m(\theta, \phi) \quad \Rightarrow \quad R_l(r) Y_l^m(\theta, \phi) \\ \therefore \begin{cases} \langle \mathbf{x} | \hat{L}_+ | E, l, m \rangle = c \langle \mathbf{x} | E, l, m+1 \rangle = c R_{l, m+1}(r) Y_l^{m+1}(\theta, \phi) \\ \parallel \\ \tilde{L}_+ \langle \mathbf{x} | E, l, m \rangle = \tilde{L}_+ (R_{lm}(r) Y_l^m(\theta, \phi)) = c R_{lm}(r) Y_l^{m+1}(\theta, \phi) \end{cases} \end{aligned}$$

すなわち、 $R_l(r)$ は m によらない。

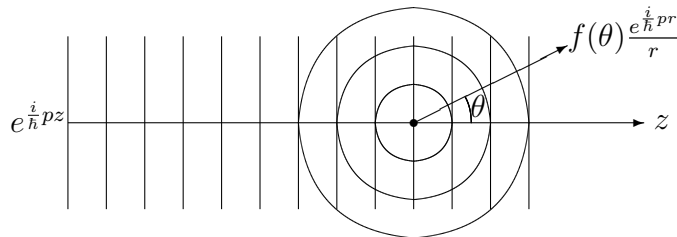
- $\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle$ を満たす一般の状態 $|\psi\rangle$ は

$$|\psi\rangle = \sum_{l,m} |E, l, m\rangle \psi_{lm}$$

$$\psi(\mathbf{x}) \equiv \langle \mathbf{x} | \psi \rangle = \sum_{l,m} \langle \mathbf{x} | E, l, m \rangle \psi_{lm} = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l R_l(r) Y_l^m(\theta, \phi) \psi_{lm}$$

部分波展開

- 入射方向を z 軸にとるとポテンシャルも入射波も z 軸回りに回転対称。



したがって $\psi(\mathbf{x})$ も z 軸回りに回転対称。

$\psi(\mathbf{x})$ は ϕ に依存しない。 $Y_l^m \propto e^{im\phi} \Rightarrow m = 0$ のみ

$$Y_l^0 \propto P_l^0(\cos \theta) \equiv P_l(\cos \theta) \quad \text{ルジャンドル関数}$$

$$\text{よって } \psi(\mathbf{x}) = \sum_{l=0}^{\infty} R_l(r) P_l(\cos \theta) \psi_l$$

- 座標表示のハミルトニアン \tilde{H} は

$$\tilde{H} = \frac{1}{2m} \tilde{\mathbf{p}}^2 + V(r) = \frac{1}{2m} \left(-\hbar^2 \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{1}{r^2} \tilde{\mathbf{L}}^2 \right) + V(r)$$

\downarrow
 $\hbar^2 l(l+1)$

- $\tilde{H}\psi(\mathbf{x}) = E\psi(\mathbf{x})$ から $R_l(r)$ は

$$\left[-\frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} r + \frac{l(l+1)}{r^2} + \frac{2m}{\hbar^2} V(r) \right] R_l(r) = k^2 R_l(r) \quad : \quad E \equiv \frac{\hbar^2 k^2}{2m}, \quad p = \hbar k$$

を満たす。

- $0 \leq r < \infty$ で有限な解 $R_l(r)$: $V(r)$ を与えると一意的に定まる。

$V(r) = 0$ の解

$kr \equiv x$ とおくと

$$\left(\frac{1}{x} \frac{d^2}{dx^2} x - \frac{l(l+1)}{x^2} + 1 \right) F_l(x) = 0 \quad : \quad \text{球ベッセルの微分方程式}$$

- 解は (演習問題 (V-4-1) 参照)

$$j_l(x) = (-1)^l x^l \left(\frac{1}{x} \frac{d}{dx} \right)^l \left(\frac{\sin x}{x} \right) \quad : \text{球ベッセル関数} \quad j_l \xrightarrow{x \rightarrow 0} \frac{2^l l!}{(2l+1)!} x^l$$

$$n_l(x) = (-1)^{l+1} x^l \left(\frac{1}{x} \frac{d}{dx} \right)^l \left(\frac{\cos x}{x} \right) \quad : \text{球ノイマン関数} \quad n_l \xrightarrow{x \rightarrow 0} \frac{(2l)!}{2^l l!} \frac{1}{x^{l+1}} \quad (\text{原点で発散})$$

- 平面波 : 全空間で有限な $V = 0$ の解 $\Rightarrow j_l(kr)P_l(\cos \theta)$ で表わされる。

$$e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} = e^{ikr \cos \theta} = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l j_l(kr) P_l(\cos \theta) \quad (\text{演習問題 (V-4-2) 参照})$$

$r > R$ の $R_l(r)$

$V(r) = 0 \Rightarrow R_l(r)$ は $j_l(kr)$ と $n_l(kr)$ の重ね合わせ

$$R_l(r) \underset{r > R}{=} \frac{1}{2} (j_l(kr) - in_l(kr)) + e^{2i\delta_l} \frac{1}{2} (j_l(kr) + in_l(kr))$$

j_l と n_l の漸近形

$$\begin{cases} j_l + in_l \xrightarrow{r \rightarrow \infty} (-i)^{l+1} \frac{1}{k} \frac{e^{ikr}}{r} & : \text{外向き球面波} \\ j_l - in_l \xrightarrow{r \rightarrow \infty} (i)^{l+1} \frac{1}{k} \frac{e^{-ikr}}{r} & : \text{内向き球面波} \end{cases}$$

\Downarrow 確率の保存 : [外向き流束] = [内向き流束]

$$|e^{2i\delta_l}| = 1 \quad \delta_l : \text{phase shift} \quad \leftarrow V(r) \text{ を与えると定まる。}$$

5.5 散乱振幅

- 散乱の境界条件

$$\psi(r, \theta) \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} e^{ikr \cos \theta} + f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r}$$

[平面波] + [外向き球面波]

$$R_l(r) \underset{r > R}{=} j_l + (e^{2i\delta_l} - 1) \frac{1}{2} (j_l + in_l)$$

$$\begin{aligned} \therefore \psi(r, \theta) &= \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l R_l(r) P_l(\cos \theta) \\ &\underset{r > R}{=} e^{ikr \cos \theta} + \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l (e^{2i\delta_l} - 1) \frac{1}{2} (j_l + in_l) P_l(\cos \theta) \\ &\quad \downarrow \underset{r \rightarrow \infty}{=} \frac{1}{2} (-i)^{l+1} \frac{1}{k} \frac{e^{ikr}}{r} \\ &\equiv e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} + f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r} \end{aligned}$$

散乱振幅は

$$f(\theta) = \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) e^{i\delta_l} \sin \delta_l P_l(\cos \theta)$$

• 微分断面積

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta)|^2$$

• 全断面積

$$\begin{aligned} \sigma_{\text{Tot}} &= \int \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega \\ &= \frac{1}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{l'=0}^{\infty} (2l+1)(2l'+1) e^{i\delta_l} e^{-i\delta_{l'}} \sin \delta_l \sin \delta_{l'} \int d\Omega \underbrace{P_l(\cos \theta) P_{l'}(\cos \theta)}_{\parallel \frac{4\pi}{2l+1} \delta_{ll'}} \end{aligned}$$

$$\therefore \sigma_{\text{Tot}} = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \delta_l$$

光学定理

前方散乱振幅 ($f(\theta = 0)$) の虚数部分

$$\Im f(\theta = 0) = \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \delta_l \underbrace{P_l(1)}_{\parallel 1}$$

$$\therefore \Im f(\theta = 0) = \frac{k}{4\pi} \sigma_{\text{Tot}} \quad : \text{光学定理}$$

• 確率の流れの密度

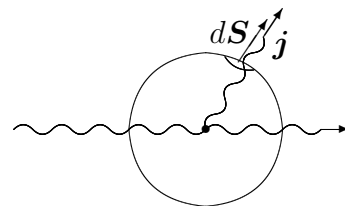
$$\mathbf{j} = \frac{-i\hbar}{2m} (\psi^* \nabla \psi - \nabla \psi^* \psi)$$

$$\psi = \psi_0 + \psi_S \quad \begin{cases} \psi_0 = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \\ \psi_S = f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r} \end{cases}$$

$$\mathbf{j} = \underbrace{\mathbf{j}_0(\psi_0 \psi_0)}_{=\frac{\hbar}{m} \mathbf{k} = \mathbf{v}} + \mathbf{j}_S(\psi_S \psi_S) + \mathbf{j}_{\text{干渉}}(\psi_0 \psi_S)$$

• 確率の保存 (定常状態)

$$\oint d\mathbf{S} \cdot \mathbf{j} = 0$$

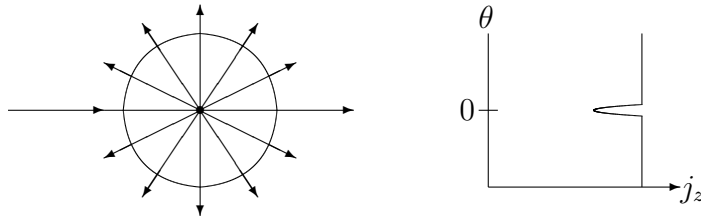


$$\oint d\mathbf{S} \cdot \mathbf{j}_0 = 0$$

$$\oint d\mathbf{S} \cdot \mathbf{j}_S = \int r^2 d\Omega \frac{\hbar k}{m} \left| \frac{f(\theta)}{r} \right|^2 = v \sigma_{\text{Tot}} \quad : \quad v = \frac{\hbar k}{m} \text{ 速度}$$

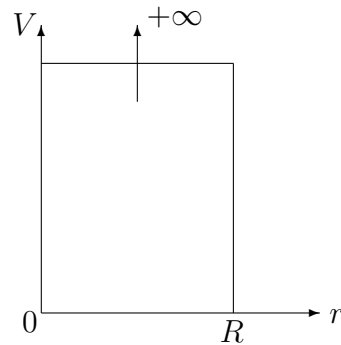
$$\oint d\mathbf{S} \cdot \mathbf{j}_{\text{干渉}} = -v \frac{4\pi}{k} \Im f(0) \quad (\text{証明は略す})$$

★ 入射波が前方 $\theta = 0$ で散乱波と干渉して入射波の確率流れの密度が $\Im f(0)$ に比例した分だけ減少している。



5.6 剛体球による散乱

$$V(r) = \begin{cases} +\infty & r < R \\ 0 & r > R \end{cases}$$



● 境界条件は $r = R$ で $\psi(\mathbf{x}) = 0$

$$0 = R_l(R) = \frac{1}{2} (j_l(kR) - in_l(kR)) + e^{2i\delta_l} \frac{1}{2} (j_l(kR) + in_l(kR))$$

$$= e^{i\delta_l} (j_l(kR) \cos \delta_l - n_l(kR) \sin \delta_l)$$

$$\therefore \tan \delta_l = \frac{j_l(kR)}{n_l(kR)}$$

$$\sigma_{\text{Tot}} = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \delta_l = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{4\pi}{k^2} \frac{(2l+1)j_l^2(kR)}{j_l^2(kR) + n_l^2(kR)}$$

● 低エネルギー散乱 : $k \rightarrow 0$

$$\tan \delta_l \cong -\frac{2^{2l}(l!)^2(kR)^{2l+1}}{(2l+1)[(2l)!]^2} \quad \therefore \begin{cases} j_l(x) \sim \frac{2^l l!}{(2l+1)!} x^l \\ n_l(x) \sim \frac{(2l)!}{2^l l!} \frac{1}{x^{l+1}} \end{cases}$$

$k \rightarrow 0$ では $l = 0$ の部分波のみが残る。

$$\tan \delta_0 = \frac{\sin kR/kR}{-\cos kR/kR} = -\tan kR$$

$$\therefore \delta_0 = -kR$$

$$f(\theta) \cong -R \quad \because P_0 = 1$$

$$\sigma_{\text{Tot}} \cong 4\pi R^2 \quad : \text{古典論の4倍 (剛体球の表面積)}$$

第6章 量子力学における近似法

6.1 準古典近似

シュレディンガー方程式

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right] \psi(x, t)$$

- エネルギー E の定常状態を

$$\psi(x, t) = \phi(x) e^{-\frac{i}{\hbar} E t} \quad \phi(x) = e^{\frac{i}{\hbar} S(x)}$$

とおくと S は

$$E = \frac{1}{2m} (S')^2 - \frac{i\hbar}{2m} S'' + V \quad \prime \equiv \frac{d}{dx} \quad (6.1)$$

★ $\hbar \rightarrow 0$ とおくと第2項が無視できて古典力学のハミルトン・ヤコビの方程式になる。

- 運動が準古典的で

$$\hbar |S''| \ll |S'|^2$$

の時には S を \hbar でベキ展開して

$$S = S_0 + \hbar S_1 + \dots$$

(6.1) 式が \hbar の各ベキで成り立つと要請

$$\hbar^0 : \quad E = \frac{1}{2m} (S'_0)^2 + V \quad (6.2)$$

$$\hbar^1 : \quad 0 = \frac{1}{m} S'_0 S'_1 - \frac{i}{2m} S''_0 \quad (6.3)$$

- (6.2) より

$$S'_0 = \pm \sqrt{2m(E - V)}$$

(6.3) より

$$S'_1 = \frac{i}{2} \frac{S''_0}{S'_0} = \frac{i}{2} (\log S'_0)' \Rightarrow S_1 = i \log \sqrt{S'_0} + [\text{定数}]$$

- よって $\phi = e^{\frac{i}{\hbar}S}$ は \hbar の1次までの近似で

$$\phi = e^{\frac{i}{\hbar}S_0 + iS_1} = c \frac{1}{\sqrt{S'_0}} e^{\frac{i}{\hbar}S_0} \quad : \quad S_0 = \pm \int^x dy \sqrt{2m(E - V(y))}$$

WKB 近似 (Wentzel, Kramers, Brillouin)
ブリュアン

一般解

- $E > V(x)$ の領域: $p(x) \equiv \sqrt{2m(E - V(x))}$ とおいて

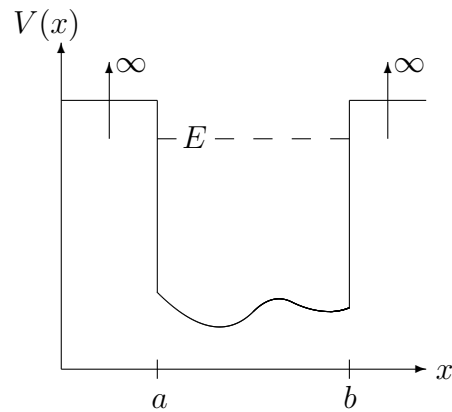
$$\phi(x) = c_1 \frac{1}{\sqrt{p(x)}} e^{\frac{i}{\hbar} \int^x dy p(y)} + c_2 \frac{1}{\sqrt{p(x)}} e^{-\frac{i}{\hbar} \int^x dy p(y)}$$

- $E < V(x)$ の領域: $\kappa(x) \equiv \sqrt{2m(V(x) - E)}$ とおいて

$$\phi(x) = c'_1 \frac{1}{\sqrt{\kappa(x)}} e^{-\frac{1}{\hbar} \int^x dy \kappa(y)} + c'_2 \frac{1}{\sqrt{\kappa(x)}} e^{\frac{1}{\hbar} \int^x dy \kappa(y)}$$

例

$$x \leq a, \quad x \geq b \quad \text{で} \quad \phi(x) = 0$$



$$\phi(a) = 0 \quad \text{より} \quad \phi(x) = c \frac{1}{\sqrt{p(x)}} \sin \left[\frac{1}{\hbar} \int_a^x dy p(y) \right]$$

$$\phi(b) = 0 \quad \text{より} \quad \frac{1}{\hbar} \int_a^b dy p(y) = n\pi \quad n: \text{整数}$$

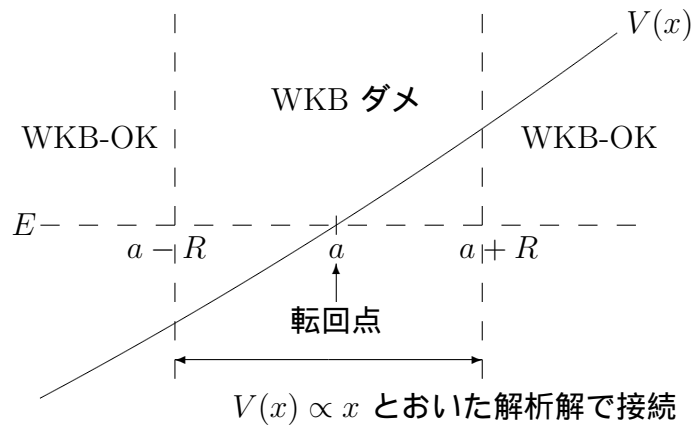
E の関数 $\Rightarrow E = E_n$ エネルギー固有値が決まる。

解の接続

- WKB 近似の成立領域

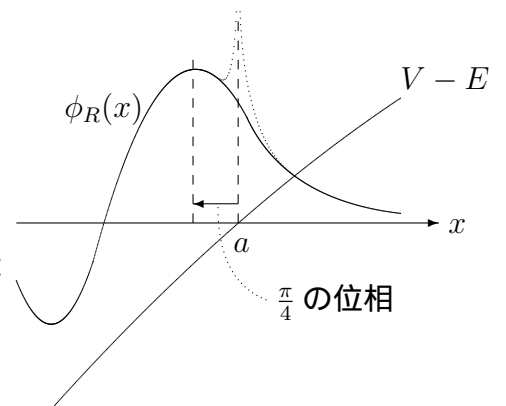
$$1 \gg \left| \frac{\hbar S''}{(S')^2} \right| = \left| \frac{\hbar p'}{p^2} \right|, \quad \left| \frac{\hbar \kappa'}{\kappa^2} \right|$$

- 古典的転回点 : $E - V(x) = 0 \rightarrow p, \kappa = 0$: WKB 近似はダメ

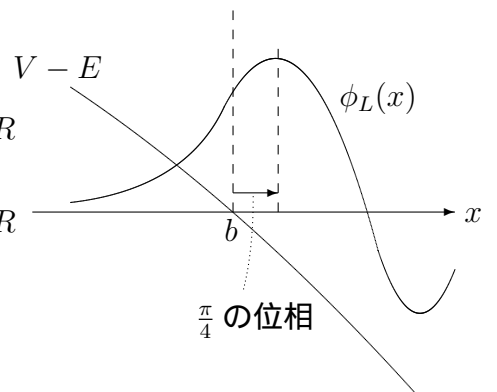


接続公式 I (減衰解 $\phi(x)$)

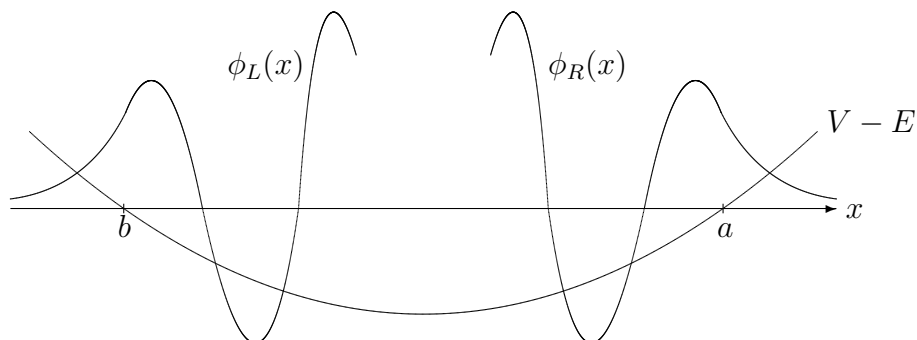
$$\begin{aligned} \phi_R(x) &= \frac{1}{\sqrt{\kappa(x)}} \exp \left[-\frac{1}{\hbar} \int_a^x dy \kappa(y) \right] & x > a + R \\ &= \frac{2}{\sqrt{p(x)}} \cos \left[\frac{1}{\hbar} \int_x^a dy p(y) - \frac{\pi}{4} \right] & x < a - R \end{aligned}$$



$$\begin{aligned} \phi_L(x) &= \frac{1}{\sqrt{\kappa(x)}} \exp \left[-\frac{1}{\hbar} \int_x^b dy \kappa(y) \right] & x < b - R \\ &= \frac{2}{\sqrt{p(x)}} \cos \left[\frac{1}{\hbar} \int_b^x dy p(y) - \frac{\pi}{4} \right] & x > b + R \end{aligned}$$



ボーア・ゾンマーフェルトの量子化規則



- $b + R < x < a - R$ で

$$\begin{aligned}\phi_R(x) &= \frac{2}{\sqrt{p(x)}} \cos \left[\frac{1}{\hbar} \int_a^x dy p(y) + \frac{\pi}{4} \right] & \because \cos \theta = \cos(-\theta) \\ &= \frac{2}{\sqrt{p(x)}} \cos \left[\frac{1}{\hbar} \int_b^x dy p(y) - \frac{\pi}{4} - \frac{1}{\hbar} \int_b^a dy p(y) + \frac{\pi}{2} \right] \\ &\qquad \qquad \qquad \phi_L(x) \leftarrow\end{aligned}$$

- 解がつながる条件: $\phi_R(x) = \phi_L(x)$ or $\phi_R(x) = -\phi_L(x)$

$$\begin{aligned}\frac{1}{\hbar} \int_a^b dy p(y) &= \left(n + \frac{1}{2} \right) \pi & n: \text{整数} \\ \Downarrow \\ E &= E_n\end{aligned}$$

例 調和振動子: $V = \frac{m\omega^2}{2}x^2$

$$\begin{aligned}p(x) &= \sqrt{2m \left(E - \frac{m\omega^2}{2}x^2 \right)} & ; \quad a = -b = \sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}} \\ \int_{-a}^a dy p(y) &= a \int_{-1}^1 dt \sqrt{2mE(1-t^2)} & ; \quad y \equiv at\end{aligned}$$

公式 $\int_{-1}^1 \sqrt{1-x^2} dx = \frac{\pi}{2}$ により

$$\int_{-a}^a dy p(y) = a\sqrt{2mE} \cdot \frac{\pi}{2} = \frac{\pi E}{\omega}$$

よって

$$E = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad \text{O.K. (うまくいきすぎ)}$$

接続公式 II (増大解 $\chi(x)$)

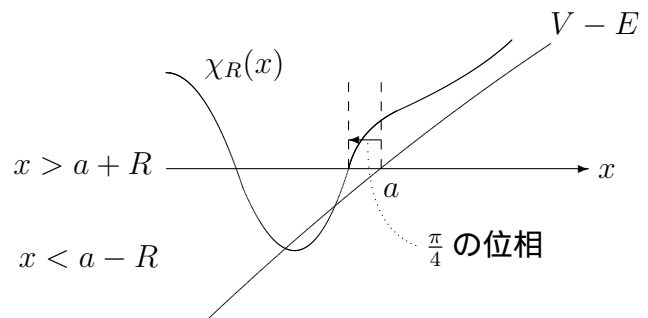
- $\phi(x)$ と $\chi(x)$ が共にエネルギー E の固有関数の時

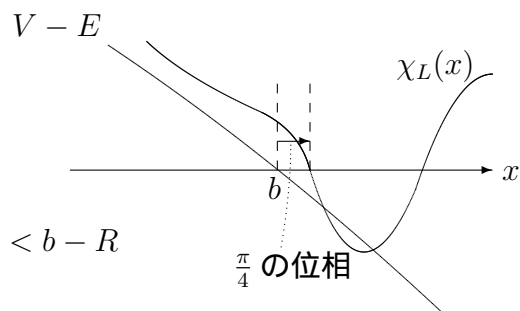
ロンスキアの定理

$$\phi'(x)\chi(x) - \phi(x)\chi'(x) = [\text{定数}]$$

これにより増大解 $\chi(x)$ の接続が定まる。

$$\begin{aligned}\chi_R(x) &= \frac{1}{\sqrt{\kappa(x)}} \exp \left[\frac{1}{\hbar} \int_a^x dy \kappa(y) \right] & x > a + R \\ &= -\frac{2}{\sqrt{p(x)}} \sin \left[\frac{1}{\hbar} \int_x^a dy p(y) - \frac{\pi}{4} \right] & x < a - R\end{aligned}$$



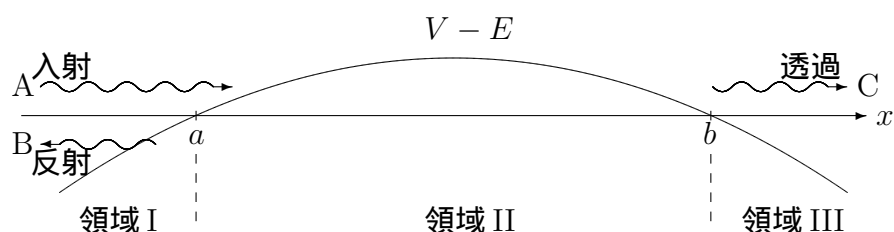


$$\chi_L(x) = \frac{1}{\sqrt{\kappa(x)}} \exp \left[\frac{1}{\hbar} \int_x^b dy \kappa(y) \right] \quad x < b - R$$

$$= -\frac{2}{\sqrt{p(x)}} \sin \left[\frac{1}{\hbar} \int_b^x dy p(y) - \frac{\pi}{4} \right] \quad x > b + R$$

[問題] ϕ_R, χ_R 及び ϕ_L, χ_L が WKB 近似の成立領域でロンスキアの定理を満たしていることを確かめよ。

トンネル効果



領域 III (右側に進む透過波のみ)

$$\phi \equiv \frac{C}{\sqrt{p(x)}} \exp i \left[\frac{1}{\hbar} \int_b^x dy p(y) - \frac{\pi}{4} \right]$$

$$= \frac{C}{\sqrt{p(x)}} \left\{ \cos \left[\frac{1}{\hbar} \int_b^x dy p(y) - \frac{\pi}{4} \right] + i \sin \left[\frac{1}{\hbar} \int_b^x dy p(y) - \frac{\pi}{4} \right] \right\}$$

領域 II (それぞれを b で接続して)

$$\phi = \frac{C}{2\sqrt{\kappa(x)}} \exp \left[-\frac{1}{\hbar} \int_x^b dy \kappa(y) \right] + \frac{iC}{\sqrt{\kappa(x)}} \exp \left[\frac{1}{\hbar} \int_x^b dy \kappa(y) \right]$$

$x \rightarrow a$ で減少・無視する $x \rightarrow a$ で増大

$$= \frac{iC}{\sqrt{\kappa(x)}} \exp \left[\frac{1}{\hbar} \int_a^b dy \kappa(y) \right] \exp \left[-\frac{1}{\hbar} \int_a^x dy \kappa(y) \right]$$

領域 I (a で接続)

$$\phi = iC \exp \left[\frac{1}{\hbar} \int_a^b dy \kappa(y) \right] \frac{2}{\sqrt{p(x)}} \cos \left[\frac{1}{\hbar} \int_x^a dy p(y) - \frac{\pi}{4} \right]$$

$$\equiv \frac{A}{\sqrt{p(x)}} \exp -i \left[\frac{1}{\hbar} \int_x^a dy p(y) - \frac{\pi}{4} \right] + \frac{B}{\sqrt{p(x)}} \exp i \left[\frac{1}{\hbar} \int_x^a dy p(y) - \frac{\pi}{4} \right]$$

$$A = B = iC \exp \left[\frac{1}{\hbar} \int_a^b dy \kappa(y) \right]$$

$$\therefore C = -iA \exp \left[-\frac{1}{\hbar} \int_a^b dy \kappa(y) \right]$$

トンネル効果の透過率 T は WKB 近似で

$$T \equiv \frac{|C|^2}{|A|^2} = \exp \left[-\frac{2}{\hbar} \int_a^b dy \kappa(y) \right]$$

6.2 変分法

- \hat{H} の基底状態 $\hat{H}|E_0\rangle = E_0|E_0\rangle$ の固有値 E_0 を近似的に求めたい。
- 一般の状態 $|\psi\rangle$ ($\langle\psi|\psi\rangle = 1$) は

$$|\psi\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} |E_n\rangle \langle E_n|\psi\rangle$$

$|\psi\rangle$ についての \hat{H} の期待値は

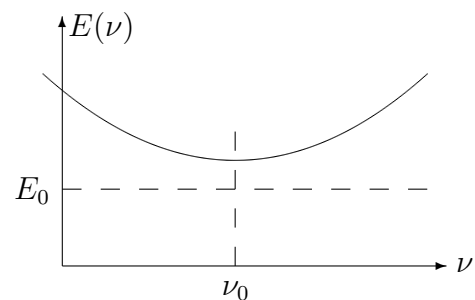
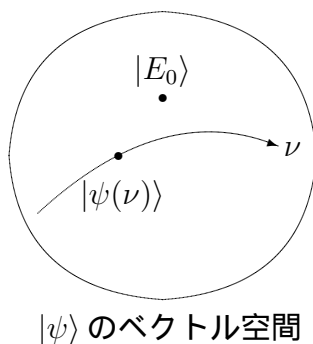
$$\begin{aligned} \langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle &= \sum_{m,n=0}^{\infty} \langle\psi|E_m\rangle \langle E_m|\hat{H}|E_n\rangle \langle E_n|\psi\rangle \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \langle\psi|E_n\rangle E_n \langle E_n|\psi\rangle \\ &\geq \sum_{n=0}^{\infty} \langle\psi|E_n\rangle E_0 \langle E_n|\psi\rangle \quad \because E_n \geq E_0 \\ &= E_0 \langle\psi|\psi\rangle = E_0 \end{aligned}$$

すなわち

$$\langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle \geq E_0$$

- $\{|\psi(\nu)\rangle\}$: パラメータ ν で変化する状態ベクトルの集合

$$E(\nu) \equiv \langle\psi(\nu)|\hat{H}|\psi(\nu)\rangle \geq E_0$$



- $E(\nu)$ が E_0 に一番近いのは $E(\nu)$ の極小値

$$\frac{dE(\nu)}{d\nu} = 0 \Rightarrow \text{解 } \nu = \nu_0$$

$E(\nu_0)$: E_0 の上限を与える近似値

$\psi(x; \nu) \equiv \langle x | \psi(\nu) \rangle$: 試行関数

- パラメーターの数をふやすと

$$|\psi(\boldsymbol{\nu})\rangle \quad \boldsymbol{\nu} = (\nu_1, \dots, \nu_N)$$

$$E(\boldsymbol{\nu}) = \langle \psi(\boldsymbol{\nu}) | \hat{H} | \psi(\boldsymbol{\nu}) \rangle$$

$$\frac{\partial E(\boldsymbol{\nu})}{\partial \nu_i} = 0 \quad (i = 1, \dots, N) \Rightarrow \boldsymbol{\nu} = \boldsymbol{\nu}_0$$

↓

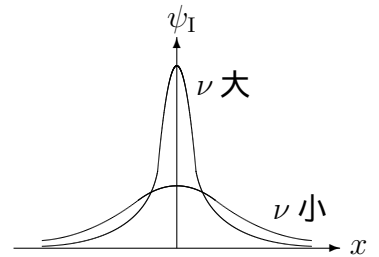
$$E(\boldsymbol{\nu}_0)$$

例

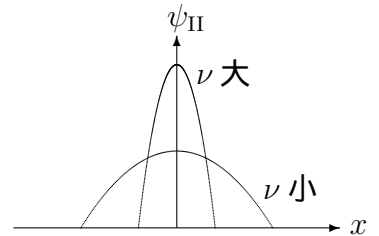
$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \hat{p}^2 + \frac{\hbar^2 \lambda^2}{2m} (\lambda \hat{x})^{2N} \quad N = 1, 2, 3, \dots$$

- 試行関数 (基底状態)

$$\psi_{\text{I}}(x; \nu) = \sqrt{\frac{\nu}{\sqrt{\pi}}} e^{-\frac{\nu^2}{2} x^2} \quad : -\infty < x < \infty$$



$$\psi_{\text{II}}(x; \nu) = \begin{cases} \sqrt{\nu} \cos \frac{\pi \nu x}{2} & : -\nu^{-1} \leq x \leq \nu^{-1} \\ 0 & : x < -\nu^{-1}, \nu^{-1} < x \end{cases}$$



$$E_0(\nu_0) \equiv \frac{\hbar^2 \lambda^2}{2m} f_N^{(\text{I, II})} \quad E_0 \equiv \frac{\hbar^2 \lambda^2}{2m} f_N \quad (\text{真の値})$$

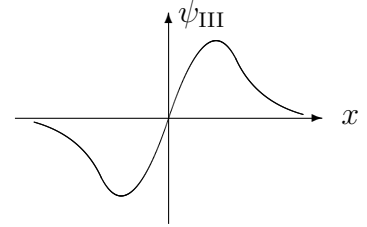
N	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
$f_N^{(\text{I})}$	1.00	1.08	1.22	1.38	1.55	1.72	1.90	2.06	2.25	2.43
$f_N^{(\text{II})}$	1.14	1.19	1.26	1.33	1.40	1.46	1.51	1.55	1.59	1.63
f_N	1.00	1.06	1.14	1.23	1.30	1.36	1.42	1.47	1.52	1.55

$N \geq 4$ では ψ_{II} のほうが ψ_{I} より近似が良い。

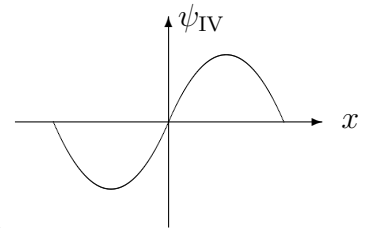
• 試行関数 (第1励起状態)

ポテンシャルが偶関数 ($V(-x) = V(x)$) なので、固有関数は偶関数 ($\phi(-x) = \phi(x)$) あるいは奇関数 ($\phi(-x) = -\phi(x)$)。基底状態は偶関数で第1励起状態は奇関数だから $\langle \text{奇状態} | E_0 \rangle = 0$, $\langle \text{奇状態} | \hat{H} | \text{奇状態} \rangle \geq E_1$ 、すなわち、試行関数を奇関数にとると第1励起状態のエネルギー E_1 の上限が求められる。

$$\psi_{\text{III}}(x; \nu) = \sqrt{\frac{\nu}{2\sqrt{\pi}}} 2\nu x e^{-\frac{\nu^2}{2}x^2} \quad : -\infty < x < \infty$$



$$\psi_{\text{IV}}(x; \nu) = \begin{cases} \sqrt{\nu} \sin \pi \nu x & : -\nu^{-1} \leq x \leq \nu^{-1} \\ 0 & : x < -\nu^{-1}, \nu^{-1} < x \end{cases}$$



$$E_1(\nu_0) \equiv \frac{\hbar^2 \lambda^2}{2m} f_N^{(\text{III}, \text{IV})} \quad E_1 \equiv \frac{\hbar^2 \lambda^2}{2m} f_N \quad (\text{真の値})$$

N	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
$f_N^{(\text{III})}$	3.00	4.85	7.09	9.74	12.8	16.3	20.2	24.5	29.3	34.4
$f_N^{(\text{IV})}$	3.34	4.22	4.76	5.16	5.47	5.74	5.97	6.17	6.34	6.50
f_N	3.00	3.80	4.34	4.76	5.10	5.39	5.64	5.85	6.05	6.22

$N \geq 2$ で ψ_{IV} のほうが ψ_{III} よりはるかに近似が良い。

★ N が大きくなると ψ_{II} と ψ_{IV} の近似が良くなっているが、これは、 $N \rightarrow \infty$ でポテンシャルが $-\lambda^{-1} < x < \lambda$ で無限に深い井戸型ポテンシャルとなり ψ_{II} と ψ_{IV} が $\nu = \lambda$ で厳密解になることによる。

6.3 切断近似

$$\hat{H}|E_n\rangle = E_n|E_n\rangle \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

- E_n と $|E_n\rangle$ を近似的にでも求めたい。
- $\{|i\rangle ; i = 1, 2, \dots\}$ を既知の完全系のセットとする。

$$\langle i|j\rangle = \delta_{ij}, \quad \sum_{i=1}^{\infty} |i\rangle\langle i| = \hat{1}$$

- 表示の変換の一般論 (1.4 節) により、行列

$$H_{ij} \equiv \langle i | \hat{H} | j \rangle$$

をユニタリー変換で

$$\sum_{i,j=1}^{\infty} U_{mi} H_{ij} U_{jn}^{\dagger} = E_m \delta_{mn}, \quad U^{\dagger} U = U U^{\dagger} = 1$$

と対角化すると、 \hat{H} の固有値は E_m 、固有ベクトルは

$$|E_m\rangle = \sum_{i=1}^{\infty} |i\rangle U_{im}^{\dagger}$$

- 一般に H は無限行列

$$H = \left(\begin{array}{cccc|c} H_{11} & H_{12} & \cdot & \cdot & H_{1N} & \cdot \\ H_{21} & H_{22} & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ H_{N1} & \cdot & \cdot & \cdot & H_{NN} & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \end{array} \right)$$

- 行列 H を $N \times N$ 行列に切断し、有限行列の対角化で

$$\sum_{i,j=1}^N V_{mi} H_{ij} V_{jn}^{\dagger} = \bar{E}_m \delta_{mn}, \quad V V^{\dagger} = V^{\dagger} V = 1$$

$$|\bar{E}_m\rangle \equiv \sum_{i=1}^N |i\rangle V_{im}^{\dagger}$$

とすると、 $|\bar{E}_m\rangle$ は

$$\langle \bar{E}_m | \bar{E}_n \rangle = \delta_{mn}, \quad \langle \bar{E}_m | \hat{H} | \bar{E}_n \rangle = \bar{E}_m \delta_{mn}$$

を満たす。

- $N \rightarrow \infty$ では $\bar{E}_m \rightarrow E_m$, $|\bar{E}_m\rangle \rightarrow |E_m\rangle$
- しかし有限の N では \bar{E}_m , $|\bar{E}_m\rangle$ は $\{|i\rangle; i=1, \dots, N\}$ の採用のしかたに依存する。

$\{|i\rangle\}$ をうまくとらなければならない。

例えば

$$H = \left(\begin{array}{c|c} a & c \\ \hline c & b \end{array} \right) \quad (a < b) \quad \text{の固有値は}$$

$$E_1 = \frac{1}{2} \left(a + b - \sqrt{(b-a)^2 + 4c^2} \right), \quad E_2 = \frac{1}{2} \left(a + b + \sqrt{(b-a)^2 + 4c^2} \right)$$

- E_1 が a で近似できる条件は何か?

$$\begin{aligned} E_1 &= \frac{1}{2} \left\{ a + b - (b-a) \sqrt{1 + \frac{4c^2}{(b-a)^2}} \right\} \\ &\simeq \frac{1}{2} \left\{ a + b - (b-a) \left(1 + \frac{2c^2}{(b-a)^2} \right) \right\} \quad \left| \frac{c}{b} \right| \ll 1 \text{ とする} \\ &= a - \frac{c^2}{b-a} \end{aligned}$$

- $|E_1 - a| \ll a$ の条件は

$$\left| \frac{c^2}{b-a} \right| \sim \left| \frac{c^2}{b} \right| \ll |a| \rightarrow |c^2| \ll |ab|$$

一般の H の場合

- 切断した効果が H_{ij} の低準位の固有値に大きな影響を与えない条件は大雑把にいうと

$$|H_{iM}|^2 \ll |H_{ii}H_{MM}| \quad \begin{cases} i \ll N \\ M \gtrsim N \end{cases} \quad \left(\begin{array}{c|c} H_{ii} & H_{iM} \\ \hline H_{Mi} & H_{MM} \end{array} \right)$$

- この条件が満たされるような $\{|i\rangle\}$ をもちいれば $m \ll N$ の準位は

$$E_m \simeq \bar{E}_m, \quad |E_m\rangle \simeq |\bar{E}_m\rangle \quad m \ll N$$

で近似できる。

付録A 公式集

(大文字は演算子，小文字は定数)

[I] 一般に成り立つ公式 (I は単位演算子)

$$[X, AB] = [X, A]B + A[X, B] \quad (\text{A.1})$$

$$[X, ABC] = [X, A]BC + A[X, B]C + AB[X, C] \quad (\text{A.2})$$

$$[X, A_1 \cdots A_n] = \sum_{i=1}^n A_1 \cdots A_{i-1} [X, A_i] A_{i+1} \cdots A_n \quad (\text{A.3})$$

$$[X, [Y, Z]] + [Y, [Z, X]] + [Z, [X, Y]] = 0 \quad (\text{A.4})$$

$$e^X \equiv 1 + X + \frac{1}{2!}X^2 + \frac{1}{3!}X^3 + \cdots = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!}X^n \quad (\text{A.5})$$

$$e^X e^{-X} = e^{-X} e^X = I \quad (\text{A.6})$$

$$e^X A e^{-X} = A + [X, A] + \frac{1}{2!} [X, [X, A]] + \frac{1}{3!} [X, [X, [X, A]]] + \cdots \quad (\text{A.7})$$

$$e^X f(A) e^{-X} = f(e^X A e^{-X}) \quad ; \quad f(A) \equiv \sum_{n=0}^{\infty} f_n A^n \quad (\text{A.8})$$

[II] $[X, A] = aI$ のとき

$$[X, A^n] = n a A^{n-1} \quad (\text{A.9})$$

$$[X, f(A)] = a f'(A) \quad (\text{A.10})$$

$$e^X f(A) e^{-X} = f(A + a) \quad (\text{A.11})$$

[III] $[X, A] = xA$ のとき

$$[X, A^n] = n x A^n \quad (\text{A.12})$$

$$[X, f(A)] = x A f'(A) \quad (\text{A.13})$$

$$e^X A e^{-X} = e^x A \quad (\text{A.14})$$

[IV] より高度な公式

$$e^{A+B} = e^A e^B e^{-\frac{1}{2}[A, B]} \quad \text{ただし } [A, B] = cI \quad (\text{A.15})$$

$$\log(1 + X) \equiv X - \frac{1}{2}X^2 + \frac{1}{3}X^3 - \cdots = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^{n-1}}{n} X^n \quad (\text{A.16})$$

$$\det X = e^{\text{tr}(\log X)} \quad (\text{A.17})$$

$$\frac{d}{ds} e^{X(s)} = \int_0^1 dt e^{(1-t)X(s)} \frac{dX(s)}{ds} e^{tX(s)} \quad (\text{A.18})$$

$$\frac{d}{ds} \det X(s) = \det X(s) \operatorname{tr} \left[X^{-1}(s) \frac{dX(s)}{ds} \right] \quad (\text{A.19})$$

公式の証明

[I] 公式 (A.7) の証明

$$A(t) \equiv e^{tX} A e^{-tX} \quad \text{とおくと} \quad (\text{A.20})$$

$$\frac{d}{dt} A(t) = e^{tX} X A e^{-tX} - e^{tX} A X e^{-tX} = [X, A(t)] \quad (\text{A.21})$$

$$A(t) \equiv \sum_{n=0}^{\infty} \frac{t^n}{n!} A_n \quad \text{と展開して代入すると} \quad (\text{A.22})$$

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{t^{n-1}}{(n-1)!} A_n = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{t^n}{n!} [X, A_n] = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{t^{n-1}}{(n-1)!} [X, A_{n-1}] \quad (\text{A.23})$$

$$\text{よって} \quad A_n = [X, A_{n-1}] \quad (\text{A.24})$$

$$A_0 = A(0) = A, \quad A_1 = [X, A], \quad A_2 = [X, [X, A]], \dots \quad (\text{A.25})$$

[IV] 公式 (A.15) の証明 $[A, B] = cI$ のとき, $[A, [A, B]] = [B, [A, B]] = 0$

$$U(t) \equiv e^{t(A+B)} e^{-tB} e^{-tA} \quad (\text{A.26})$$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} U(t) &= e^{t(A+B)} (A + B - B) e^{-tB} e^{-tA} - e^{t(A+B)} e^{-tB} A e^{-tA} \\ &= e^{t(A+B)} e^{-tB} (e^{tB} A e^{-tB} - A) e^{-tA} \\ &= e^{t(A+B)} e^{-tB} [tB, A] e^{-tA} \\ &= U(t) [tB, A] \end{aligned} \quad (\text{A.27})$$

$$U(t) = U(0) e^{\frac{t^2}{2} [B, A]} = e^{-\frac{t^2}{2} [A, B]} \quad (\text{A.28})$$

$$e^{A+B} = U(1) e^A e^B = e^A e^B e^{-\frac{1}{2} [A, B]} \quad (\text{A.29})$$

[IV] 公式 (A.18) の証明

$$\begin{aligned} \frac{d}{ds} e^{X(s)} &= \int_0^1 dt \frac{d}{dt} \left(e^{(1-t)X(s)} \frac{d}{ds} e^{tX(s)} \right) \\ &= \int_0^1 dt e^{(1-t)X(s)} \left(-X(s) \frac{d}{ds} e^{tX(s)} + \frac{d}{ds} (X(s) e^{tX(s)}) \right) \\ &= \int_0^1 dt e^{(1-t)X(s)} \frac{dX(s)}{ds} e^{tX(s)} \end{aligned} \quad (\text{A.30})$$