量子力学II　演習問題

(I-1-1) ベクトル $|\alpha\rangle$ と $|\beta\rangle$ から任意の複素数 a, b により $|\psi\rangle = |\alpha\rangle a + |\beta\rangle b$ を構成する．

$$\langle\psi|\psi\rangle = |a|^2\langle\alpha|\alpha\rangle + |b|^2\langle\beta|\beta\rangle + a^* b\langle\alpha|\beta\rangle + b^* a\langle\beta|\alpha\rangle \tag{1}$$

を示せ．$\langle\alpha|\alpha\rangle = \langle\beta|\beta\rangle = 2$，$\langle\alpha|\beta\rangle = \langle\beta|\alpha\rangle = -1$ のときに

$$|\chi\rangle = |\alpha\rangle(-a^* + 2b^*) + |\beta\rangle(-2a^* + b^*) \tag{2}$$

が $|\psi\rangle$ と直交 ($\langle\psi|\chi\rangle = 0$) し，$\langle\chi|\chi\rangle = 3\langle\psi|\psi\rangle$ が成り立つことを確かめよ．

(I-1-2) $\{|f_i\rangle\ ; i = 1, 2, 3, \cdots, n\}$ を１次独立な n 個のベクトルの集合とする．
　まず，$|\psi_1\rangle \equiv |f_1\rangle$ とおき，$|\psi_1\rangle$ を規格化したものを $|u_1\rangle$ と定義する．

$$|u_1\rangle \equiv \frac{|\psi_1\rangle}{\sqrt{\langle\psi_1|\psi_1\rangle}} \quad : \quad \langle u_1|u_1\rangle = 1\ . \tag{3}$$

つぎに

$$|\psi_2\rangle \equiv |f_2\rangle - |u_1\rangle\langle u_1|f_2\rangle \tag{4}$$

とおく．$\langle u_1|\psi_2\rangle = 0$，すなわち $|\psi_2\rangle$ と $|u_1\rangle$ が直交していることを確かめよ．$|\psi_2\rangle$ を規格化したものを $|u_2\rangle$ と定義する．

$$|u_2\rangle \equiv \frac{|\psi_2\rangle}{\sqrt{\langle\psi_2|\psi_2\rangle}} \quad : \quad \langle u_2|u_2\rangle = 1\ ,\ \langle u_1|u_2\rangle = 0\ . \tag{5}$$

つぎに

$$|\psi_3\rangle \equiv |f_3\rangle - |u_1\rangle\langle u_1|f_3\rangle - |u_2\rangle\langle u_2|f_3\rangle \tag{6}$$

とおく．$|\psi_3\rangle$ が $|u_1\rangle$, $|u_2\rangle$ と直交していることを確かめよ．$|\psi_3\rangle$ を規格化したものを $|u_3\rangle$ と定義する．

$$|u_3\rangle \equiv \frac{|\psi_3\rangle}{\sqrt{\langle\psi_3|\psi_3\rangle}} \quad : \quad \langle u_3|u_3\rangle = 1\ ,\ \langle u_1|u_3\rangle = \langle u_2|u_3\rangle = 0\ . \tag{7}$$

同様の手続きで，規格化されたベクトル $|u_j\rangle$ $(j = 4, \cdots, n)$ を以下の手順で構成する．

$$|\psi_j\rangle \equiv |f_j\rangle - \sum_{i=1}^{j-1}|u_i\rangle\langle u_i|f_j\rangle \to |u_j\rangle \equiv \frac{|\psi_j\rangle}{\sqrt{\langle\psi_j|\psi_j\rangle}} \quad : \quad \langle u_j|u_j\rangle = 1\ , \langle u_i|u_j\rangle = 0\ (i < j)\ . \tag{8}$$

$\{|u_i\rangle\ ; i = 1, 2, \cdots, n\}$ が規格直交性 $\langle u_j|u_i\rangle = \delta_{ji}$ を満たすことを確かめよ．これはシュミットの直交化法と呼ばれる．

(I-2-1) 演算子 $\hat{F}$ のエルミート共役 $\hat{F}^\dagger$ は，任意のベクトル $|u\rangle$, $|v\rangle$ について

$$\langle u|\hat{F}^\dagger|v\rangle = \langle v|\hat{F}|u\rangle^* \tag{9}$$

で定義される．任意の演算子 $\hat{F}$, $\hat{G}$ について

$$(\hat{F}^\dagger)^\dagger = \hat{F}\ , \quad (\hat{F}\hat{G})^\dagger = \hat{G}^\dagger\hat{F}^\dagger \tag{10}$$

が成り立つことを示せ．また，

$$\hat{F}|u\rangle = |\omega\rangle \tag{11}$$

が成り立つとき

$$\langle u|\hat{F}^\dagger = \langle\omega| \tag{12}$$

が成り立つことを確かめよ．

(I-2-2) エルミート演算子 $\hat{F}$ の固有ベクトル $\hat{F}|f_i\rangle = f_i|f_i\rangle \;\; i = 1, 2, 3, \cdots \;\; \langle f_j|f_i\rangle = \delta_{ji}$ の重ね合わせのベクトル空間において，状態ベクトル

$$|\psi\rangle = |f_1\rangle\frac{1}{\sqrt{3}} + |f_2\rangle\frac{1}{\sqrt{6}} + |f_3\rangle\frac{1}{\sqrt{2}} \tag{13}$$

を定義する．$|\psi\rangle$ が $\langle\psi|\psi\rangle = 1$ と規格化されていることを確かめよ．また，$|\psi\rangle$ についての $\hat{F}^M$(M は正の整数) の期待値が以下のように表されることを確かめよ．

$$\langle F^M\rangle \equiv \langle\psi|\hat{F}^M|\psi\rangle = \frac{1}{3}f_1^M + \frac{1}{6}f_2^M + \frac{1}{2}f_3^M \; . \tag{14}$$

固有値が $f_1 = -2, \; f_2 = 1, \; f_3 = 3$ のとき，$\langle F\rangle, \; \langle F^2\rangle$ を求めよ．

(I-4-1) ２準位量子系 $\hat{F}|f_i\rangle = f_i|f_i\rangle, \; i = 1, 2, \; \langle f_i|f_j\rangle = \delta_{ij}$ の状態ベクトルの空間に作用する任意のエルミート演算子 $\hat{G}$ を考察する．２行２列の行列 G を行列要素 $G_{ij} = \langle f_i|\hat{G}|f_j\rangle$ で定義すると，演算子 $\hat{G}$ のエルミート性 $\hat{G}^\dagger = \hat{G}$ により，行列 G は

$$(G^\dagger)_{ij} = (G_{ji})^* = \langle j|\hat{G}|i\rangle^* = \langle i|\hat{G}^\dagger|j\rangle = \langle i|\hat{G}|j\rangle = G_{ij} \tag{15}$$

となるので，エルミート行列である．行列 G は G_{11} と G_{22} が実数，$G_{12} = (G_{21})^*$ を満たすので，４個の実数 g_0, g_x, g_y, g_z により

$$G_{ij} = \langle f_i|\hat{G}|f_j\rangle \equiv g_0\delta_{ij} + \sum_{a=x,y,z} g_a(\sigma_a)_{ij} \tag{16}$$

と表すことができる．ここに，$\sigma_a(a = x, y, z)$ はパウリ (Pauli) 行列

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{17}$$

である．定数 g_x, g_y, g_z を極座標流に定数 g, θ, ϕ をもちいて

$$g_x = g\sin\theta\cos\phi \; , \quad g_y = g\sin\theta\sin\phi \; , \quad g_z = g\cos\theta \tag{18}$$

と表す．行列 G がユニタリー行列

$$U = \begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2} & \sin\frac{\theta}{2}e^{-i\phi} \\ -\sin\frac{\theta}{2}e^{i\phi} & \cos\frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \; , \quad U^\dagger = \begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2} & -\sin\frac{\theta}{2}e^{-i\phi} \\ \sin\frac{\theta}{2}e^{i\phi} & \cos\frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \tag{19}$$

によって

$$UGU^\dagger = \begin{pmatrix} g_0 + g & 0 \\ 0 & g_0 - g \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} g_1 & 0 \\ 0 & g_2 \end{pmatrix} \tag{20}$$

と対角化されることを確かめよ．したがって，固有ベクトル $\hat{G}|g_m\rangle = g_m|g_m\rangle, m=1,2$ は

$$|g_1\rangle = \sum_{i=1,2}|f_i\rangle U^\dagger_{i1} = |f_1\rangle\cos\frac{\theta}{2} + |f_2\rangle\sin\frac{\theta}{2}e^{i\phi} \tag{21}$$

$$|g_2\rangle = \sum_{i=1,2}|f_i\rangle U^\dagger_{i2} = -|f_1\rangle\sin\frac{\theta}{2}e^{-i\phi} + |f_2\rangle\cos\frac{\theta}{2} \tag{22}$$

で与えられる．

(I-4-2) エルミート演算子 $\hat{F}$ と $\hat{G}$ の固有ベクトル $|f_i\rangle$ $i=1,2,\cdots$，$|g_m\rangle$ $m=1,2,\cdots$ は完全性

$$\sum_i |f_i\rangle\langle f_i| = \sum_m |g_m\rangle\langle g_m| = \hat{1} \tag{23}$$

を満たす．$\hat{F}=\hat{F}\hat{1}=\hat{1}\hat{F}\hat{1}$ および $\hat{G}=\hat{G}\hat{1}=\hat{1}\hat{G}\hat{1}$ にもとづき，演算子 $\hat{F},\hat{G}$ が

$$\hat{F} = \sum_i |f_i\rangle f_i\langle f_i| = \sum_{m,n}|g_m\rangle F_{mn}\langle g_n| \ : \qquad F_{mn} = \langle g_m|\hat{F}|g_n\rangle \tag{24}$$

$$\hat{G} = \sum_m |g_m\rangle g_m\langle g_m| = \sum_{i,j}|f_i\rangle G_{ij}\langle f_j| \ : \qquad G_{ij} = \langle f_i|\hat{G}|f_j\rangle \tag{25}$$

と表されることを示せ．

(I-4-3) 3準位量子系 $\hat{F}|f_i\rangle = f_i|f_i\rangle$，$i=1,2,3$，$\langle f_i|f_j\rangle = \delta_{ij}$ において，演算子 $\hat{G}$ を実数 g,θ により

$$\hat{G} = \sum_{i,j=1,2,3}|f_i\rangle G_{ij}\langle f_j| \ , \quad G_{ij} \equiv \begin{pmatrix} 0 & g\cos\theta & 0 \\ g\cos\theta & 0 & g\sin\theta \\ 0 & g\sin\theta & 0 \end{pmatrix} \tag{26}$$

と定義すると $\langle f_i|\hat{G}|f_j\rangle = G_{ij}$ である．行列 G を対角化するユニタリー行列を求めることにより，演算子 $\hat{G}$ の固有値

$$g_1 = g \ , \quad g_2 = 0 \ , \quad g_3 = -g \tag{27}$$

及び固有ベクトル $\hat{G}|g_i\rangle = g_i|g_i\rangle$

$$|g_1\rangle = |f_1\rangle\frac{1}{\sqrt{2}}\cos\theta + |f_2\rangle\frac{1}{\sqrt{2}} + |f_3\rangle\frac{1}{\sqrt{2}}\sin\theta \tag{28}$$

$$|g_2\rangle = |f_1\rangle\sin\theta - |f_3\rangle\cos\theta \tag{29}$$

$$|g_3\rangle = |f_1\rangle\frac{1}{\sqrt{2}}\cos\theta - |f_2\rangle\frac{1}{\sqrt{2}} + |f_3\rangle\frac{1}{\sqrt{2}}\sin\theta \tag{30}$$

を導け.

(I-5-1) エルミート演算子 $\hat{F}$ の関数 $k(\hat{F})$ をベキ展開で

$$k(\hat{F}) = \sum_{n=1}^{\infty} k_n\hat{F}^n \ : \qquad k_n\text{は定数} \tag{31}$$

と定義する．$\hat{F}$ の固有ベクトル $\hat{F}|f\rangle = f|f\rangle$ について

$$k(\hat{F})|f\rangle = k(f)|f\rangle \tag{32}$$

を示せ．また，一般の演算子 $\hat{Z}$ の関数 $k(\hat{Z})$ のエルミート共役が

$$(k(\hat{Z}))^\dagger = \sum_{n=1}^{\infty} k_n^* (\hat{Z}^\dagger)^n \tag{33}$$

となること，特に指数関数について

$$(\exp(i\hat{Z}))^\dagger = \exp(-i\hat{Z}^\dagger) \tag{34}$$

を導け．したがって，エルミート演算子 $\hat{F} = \hat{F}^\dagger$ の指数関数は

$$(\exp(i\hat{F}))^\dagger = \exp(-i\hat{F}) = (\exp(i\hat{F}))^{-1} \tag{35}$$

が成り立ち，$\exp(i\hat{F})$ はユニタリー演算子である．

(I-5-2) **公式集**の公式 [II] の (10), (11) を用いて，１次元量子系 $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$ において

$$[\hat{p}, f(\hat{x})] = -i\hbar \frac{d}{dx} f(\hat{x}) \quad , \quad [\hat{x}, g(\hat{p})] = i\hbar \frac{d}{dp} g(\hat{p}) \tag{36}$$

$$e^{\frac{i}{\hbar} b\hat{p}} f(\hat{x})\, e^{-\frac{i}{\hbar} b\hat{p}} = f(\hat{x} + b) \quad , \quad e^{-\frac{i}{\hbar} k\hat{x}} g(\hat{p})\, e^{\frac{i}{\hbar} k\hat{x}} = g(\hat{p} + k) \tag{37}$$

を確かめよ．$f(\hat{x}) = \hat{x}$, $g(\hat{p}) = \hat{p}$ のときは，

$$e^{\frac{i}{\hbar} b\hat{p}}\ \hat{x}\ e^{-\frac{i}{\hbar} b\hat{p}} = \hat{x} + b\ , \qquad e^{-\frac{i}{\hbar} k\hat{x}}\ \hat{p}\ e^{\frac{i}{\hbar} k\hat{x}} = \hat{p} + k \tag{38}$$

である．$|x\rangle$ と $|p\rangle$ がそれぞれ $\hat{x}$ と $\hat{p}$ の固有値 x, p の固有ベクトル $\hat{x}|x\rangle = x|x\rangle$, $\hat{p}|p\rangle = p|p\rangle$ のとき

$$|x + b\rangle \equiv e^{-\frac{i}{\hbar} b\hat{p}} |x\rangle\ , \qquad |p + k\rangle \equiv e^{\frac{i}{\hbar} k\hat{x}} |p\rangle \tag{39}$$

がそれぞれ固有値 $x + a$ および $p + k$ の固有ベクトル

$$\hat{x}|x + b\rangle = (x + b)|x + b\rangle\ , \qquad \hat{p}|p + k\rangle = (p + k)|p + k\rangle \tag{40}$$

であることを確かめよ．これらにもとづき

$$\langle x|\psi\rangle = \psi(x) \quad \text{のとき} \quad \langle x|e^{\frac{i}{\hbar} b\hat{p}}|\psi\rangle = \langle x + b|\psi\rangle = \psi(x + b) \tag{41}$$

$$\langle p|\psi\rangle = \psi(p) \quad \text{のとき} \quad \langle p|e^{-\frac{i}{\hbar} k\hat{x}}|\psi\rangle = \langle p + k|\psi\rangle = \psi(p + k) \tag{42}$$

を導け．また，３次元量子系における以下の対応する表式を確認せよ．

$$[\hat{\mathbf{p}}, f(\hat{\mathbf{x}})] = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} f(\hat{\mathbf{x}}) \quad , \quad [\hat{\mathbf{x}}, g(\hat{\mathbf{p}})] = i\hbar \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} g(\hat{\mathbf{p}}) \tag{43}$$

$$e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{b}\cdot\hat{\mathbf{p}}} f(\hat{\mathbf{x}}) e^{-\frac{i}{\hbar} \mathbf{b}\cdot\hat{\mathbf{p}}} = f(\hat{\mathbf{x}} + \mathbf{b}) \quad , \quad e^{-\frac{i}{\hbar} \mathbf{k}\cdot\hat{\mathbf{x}}} g(\hat{\mathbf{p}}) e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{k}\cdot\hat{\mathbf{x}}} = g(\hat{\mathbf{p}} + \mathbf{k}) \tag{44}$$

$$e^{-\frac{i}{\hbar} \mathbf{b}\cdot\hat{\mathbf{p}}} |\mathbf{x}\rangle = |\mathbf{x} + \mathbf{b}\rangle \quad , \quad e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{k}\cdot\hat{\mathbf{x}}} |\mathbf{p}\rangle = |\mathbf{p} + \mathbf{k}\rangle \tag{45}$$

$$\langle \mathbf{x}|\psi\rangle = \psi(\mathbf{x}) \quad \text{のとき} \quad \langle \mathbf{x}|e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{b}\cdot\hat{\mathbf{p}}}|\psi\rangle = \psi(\mathbf{x} + \mathbf{b}) \tag{46}$$

$$\langle \mathbf{p}|\psi\rangle = \psi(\mathbf{p}) \quad \text{のとき} \quad \langle \mathbf{p}|e^{-\frac{i}{\hbar} \mathbf{k}\cdot\hat{\mathbf{x}}}|\psi\rangle = \psi(\mathbf{p} + \mathbf{k})\ . \tag{47}$$

(I-5-3) 1 次元粒子系において状態 $|\psi_0\rangle$ が

$$(\nu^2 \hat{x} + \frac{i}{\hbar} \hat{p})|\psi_0\rangle = 0\ ,\ \langle \psi_0|\psi_0\rangle = 1 \tag{48}$$

を満たしているとき，x 表示及び p 表示の波動関数 $\langle x|\psi_0\rangle$, $\langle p|\psi_0\rangle$ は

$$\left(\nu^2 x + \frac{\partial}{\partial x}\right)\langle x|\psi_0\rangle = 0 \ , \qquad \left(i\hbar\nu^2\frac{\partial}{\partial p} + \frac{i}{\hbar}p\right)\langle p|\psi_0\rangle = 0 \tag{49}$$

を満たす．それらの解がガウス (Gauss) 型関数

$$\langle x|\psi_0\rangle = \left(\frac{\nu}{\sqrt{\pi}}\right)^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{\nu^2}{2}x^2} \ , \ \ \langle p|\psi_0\rangle = \left(\frac{1}{\sqrt{\pi}\nu\hbar}\right)^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{1}{2\hbar^2\nu^2}p^2} \tag{50}$$

で与えられることを示せ．なお，規格化のためには，公式

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-a^2x^2} = \frac{\sqrt{\pi}}{a} \tag{51}$$

を参考にせよ．

エルミート演算子の期待値は実数であるから，(48) 式より

$$\langle\psi_0|\hat{x}|\psi_0\rangle = 0 \ , \ \ \langle\psi_0|\hat{p}|\psi_0\rangle = 0 \tag{52}$$

となる．(48) 式及びその共役式より

$$\langle\psi_0|\left(\hat{x}(\nu^2\hat{x} + \frac{i}{\hbar}\hat{p}) + (\nu^2\hat{x} - \frac{i}{\hbar}\hat{p})\hat{x}\right)|\psi_0\rangle \ = \ 0 \tag{53}$$

$$\langle\psi_0|\left(\hat{p}(\nu^2\hat{x} + \frac{i}{\hbar}\hat{p}) - (\nu^2\hat{x} - \frac{i}{\hbar}\hat{p})\hat{p}\right)|\psi_0\rangle \ = \ 0 \tag{54}$$

が成り立つ．これから $\hat{x}^2, \hat{p}^2$ の期待値

$$\langle\psi_0|\hat{x}^2|\psi_0\rangle = \frac{1}{2}\frac{1}{\nu^2} \ , \ \ \langle\psi_0|\hat{p}^2|\psi_0\rangle = \frac{1}{2}\hbar^2\nu^2 \tag{55}$$

を導け．3 次元粒子系の場合は

$$\langle\mathbf{x}|\psi_0\rangle = \left(\frac{\nu}{\sqrt{\pi}}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{\nu^2}{2}\mathbf{x}^2} \quad , \quad \langle\mathbf{p}|\psi_0\rangle = \left(\frac{1}{\sqrt{\pi}\nu\hbar}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{1}{2\hbar^2\nu^2}\mathbf{p}^2} \tag{56}$$

$$\langle\psi_0|\hat{\mathbf{x}}^2|\psi_0\rangle = \frac{3}{2}\frac{1}{\nu^2} \quad , \quad \langle\psi_0|\hat{\mathbf{p}}^2|\psi_0\rangle = \frac{3}{2}\hbar^2\nu^2 \tag{57}$$

となることも確かめよ．

(I-6-1) ハミルトニアン $\hat{H}$ の固有値と固有ベクトルを

$$\hat{H}|E_n\rangle = E_n|E_n\rangle \ , \qquad n = 1, 2, 3, \cdots \ , \quad \langle E_m|E_n\rangle = \delta_{mn} \tag{58}$$

とする．時刻 t の状態ベクトル $|\psi(t)\rangle$ を $|E_n\rangle$ で展開して $|\psi(t)\rangle = \sum_n |E_n\rangle c_n(t)$ とおき，シュレディンガー方程式 $i\hbar\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle = \hat{H}|\psi(t)\rangle$ に代入することにより，展開係数 $c_n(t)$ が

$$i\hbar\frac{d}{dt}c_n(t) = E_n c_n(t) \tag{59}$$

に従うことを導け．また，この微分方程式を，初期条件 $c_n(0) = c_n$ のもとに解き

$$c_n(t) = c_n e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t} \tag{60}$$

を導け．これにもとづき，次式が成り立っていることを確認せよ．

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n |E_n\rangle c_n e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t} = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\sum_n |E_n\rangle c_n = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}|\psi(0)\rangle\ . \tag{61}$$

(I-6-2) ハミルトニアン $\hat{H}$ の固有ベクトル $|E_n\rangle\ n=1,2,\cdots,\langle E_m|E_n\rangle=\delta_{mn}$ から

$$|M\rangle = |E_1\rangle\cos\theta + |E_2\rangle\sin\theta\ ,\qquad |N\rangle = -|E_1\rangle\sin\theta + |E_2\rangle\cos\theta \tag{62}$$

を構成する．$\langle M|M\rangle = \langle N|N\rangle = 1$，$\langle M|N\rangle = 0$ を確認せよ．状態 $|\psi(t)\rangle$ が $t=0$ に $|\psi(0)\rangle = |M\rangle$ のとき

$$|\psi(t)\rangle = |E_1\rangle e^{-\frac{i}{\hbar}E_1 t}\cos\theta + |E_2\rangle e^{-\frac{i}{\hbar}E_2 t}\sin\theta \tag{63}$$

を確かめよ．時刻 t に状態が $|N\rangle$ である確率振幅 $A(t)$ は

$$A(t) = \langle N|\psi(t)\rangle = (-\sin\theta\langle E_1| + \cos\theta\langle E_2|)(|E_1\rangle e^{-\frac{i}{\hbar}E_1 t}\cos\theta + |E_2\rangle e^{-\frac{i}{\hbar}E_2 t}\sin\theta) \tag{64}$$

である．これから

$$A(t) = ie^{-\frac{i}{2\hbar}(E_1+E_2)t}\sin\left(\frac{1}{2\hbar}(E_1-E_2)t\right)\sin 2\theta \tag{65}$$

を導け．したがって，確率は $P(t) = |A(t)|^2 = \sin^2\left(\frac{1}{2\hbar}(E_1-E_2)t\right)\sin^2 2\theta$ である．

(I-6-3) 2 準位量子系 $\hat{F}|f_i\rangle = f_i|f_i\rangle$, $i=1,2$, $\langle f_i|f_j\rangle = \delta_{ij}$ においてハミルトニアンを

$$\hat{H} = \sum_{i,j=1,2}|f_i\rangle H_{ij}\langle f_j|\ ,\quad H_{ij} = \langle f_i|\hat{H}|f_j\rangle \equiv \hbar\omega\begin{pmatrix}\cos\theta & \sin\theta\\ \sin\theta & -\cos\theta\end{pmatrix} \tag{66}$$

で与える．問題 **(I-4-1)** により，$\hat{H}$ の固有状態 $\hat{H}|\pm\rangle = \pm\hbar\omega|\pm\rangle$ は

$$\begin{aligned}
|+\rangle &= |f_1\rangle\cos\frac{\theta}{2} + |f_2\rangle\sin\frac{\theta}{2} &(67)\\
|-\rangle &= -|f_1\rangle\sin\frac{\theta}{2} + |f_2\rangle\cos\frac{\theta}{2} &(68)\\
|f_1\rangle &= |+\rangle\cos\frac{\theta}{2} - |-\rangle\sin\frac{\theta}{2} &(69)\\
|f_2\rangle &= |+\rangle\sin\frac{\theta}{2} + |-\rangle\cos\frac{\theta}{2} &(70)
\end{aligned}$$

で与えられる．系の状態が時刻 $t=0$ に $|f_1\rangle$ であったとする．時刻 t の状態が

$$\begin{aligned}
|\psi(t)\rangle &= e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}|f_1\rangle = |+\rangle e^{-i\omega t}\cos\frac{\theta}{2} - |-\rangle e^{i\omega t}\sin\frac{\theta}{2}\\
&= |f_1\rangle(\cos\omega t - i\cos\theta\sin\omega t) - |f_2\rangle\ i\sin\theta\sin\omega t &(71)
\end{aligned}$$

となることを導け．また，時刻 t に状態が $|f_1\rangle$ である確率 $P_1(t)$ と $|f_2\rangle$ である確率 $P_2(t)$ が

$$\begin{aligned}
P_1(t) &= |\langle f_1|\psi(t)\rangle|^2 = \cos^2\omega t + \cos^2\theta\sin^2\omega t &(72)\\
P_2(t) &= |\langle f_2|\psi(t)\rangle|^2 = \sin^2\theta\sin^2\omega t &(73)
\end{aligned}$$

となり，確率の保存則 $P_1(t)+P_2(t)=1$ が満たされていることを確認せよ．

(II-3-1) 1次元調和振動子の定常状態（エネルギー固有状態）$|n\rangle$ $(n=0,1,2,\cdots)$ において，運動エネルギー $\hat{T}$ とポテンシャルエネルギー $\hat{V}$ の期待値が等しく

$$\langle n|\hat{T}|n\rangle = \langle n|\hat{V}|n\rangle = \frac{\hbar\omega}{2}(n+\frac{1}{2}) \qquad \begin{cases} \hat{T} = \frac{1}{2m}\hat{p}^2 \\ \hat{V} = \frac{m\omega^2}{2}\hat{x}^2 \end{cases} \tag{74}$$

が成り立つこと（ビリアル定理）を証明せよ．方針は，$\hat{p}^2, \hat{x}^2$ を $\hat{a}, \hat{a}^\dagger$ で表わしたとき，$\hat{a}\hat{a}, \hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger$ の期待値が 0 となることを考慮する．

(II-4-1) 1次元調和振動子の固有状態の座標表示の固有関数 $\phi_n(x)$ を導こう．定義より

$$\phi_n(x) = (n!)^{-1/2}\left[\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\nu x - \frac{1}{\nu}\frac{d}{dx}\right)\right]^n \phi_0(x) \quad , \qquad \phi_0(x) = \left(\frac{\nu}{\sqrt{\pi}}\right)^{1/2} e^{-\frac{\nu^2}{2}x^2} \tag{75}$$

である．$\nu x \equiv y$ とおくと

$$\phi_n(x) = C_n\left(y - \frac{d}{dy}\right)^n e^{-\frac{y^2}{2}} \quad , \qquad C_n = \left(\frac{\nu}{\sqrt{\pi}2^n n!}\right)^{1/2} \tag{76}$$

となる．$y - \frac{d}{dy} = e^{y^2/2}\left(-\frac{d}{dy}\right)e^{-y^2/2}$ を確かめよ．これをもちいて

$$\phi_n(x) = C_n e^{-y^2/2} e^{y^2}\left(-\frac{d}{dy}\right)^n e^{-y^2} \tag{77}$$

を導け．エルミートの多項式のロドリグの公式

$$H_n(y) = e^{y^2}\left(-\frac{d}{dy}\right)^n e^{-y^2} \tag{78}$$

により

$$\phi_n(x) = \left(\frac{\nu}{\sqrt{\pi}2^n n!}\right)^{1/2} H_n(\nu x) e^{-\frac{\nu^2}{2}x^2} \tag{79}$$

が求まる．

(II-5-1) 1次元調和振動子の状態 $|\psi(t)\rangle$ が $t=0$ に $|\psi(0)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}b\hat{p}}|0\rangle$ とする．ここに $|0\rangle$ は基底状態である．時刻 t の状態は公式 [I] の (8) をもちいると

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}e^{-\frac{i}{\hbar}b\hat{p}}|0\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}e^{-\frac{i}{\hbar}b\hat{p}}e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}|0\rangle \\ &= \exp\left(-\frac{i}{\hbar}b\; e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\hat{p}\; e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\right)e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}|0\rangle \end{aligned} \tag{80}$$

と表されるが，§II-5 で求めたハイゼンベルグ描像の演算子

$$\hat{p}(t) = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\hat{p}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} = \hat{p}\cos\omega t - \hat{x}\; m\;\omega\sin\omega t \tag{81}$$

に注意すると

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= e^{-\frac{i}{\hbar}b\hat{p}(-t)}e^{-\frac{i}{\hbar}E_0 t}|0\rangle \\ &= e^{-\frac{i}{\hbar}b(\hat{p}\cos\omega t + \hat{x}m\omega\sin\omega t)}e^{-\frac{i}{\hbar}E_0 t}|0\rangle \end{aligned} \tag{82}$$

と表される．公式 [IV] の (15) によって最初の指数関数の演算子を２個の演算子と定数の積に分解し，**(I-5-2)** の (41) をもちいることにより x 表示の波動関数 $\psi(x,t) = \langle x|\psi(t)\rangle$

$$\psi(x,t) = \left(\frac{\nu}{\sqrt{\pi}}\right)^{1/2} e^{i\phi(t)} e^{\frac{i}{\hbar}p_0(t)(x-x_0(t))} e^{-\frac{\nu^2}{2}(x-x_0(t))^2} \tag{83}$$

$$\begin{cases} x_0(t) &\equiv& b\cos\omega t \\ p_0(t) &\equiv& -bm\omega\sin\omega t = -b\hbar\nu^2\sin\omega t \\ \phi(t) &\equiv& -\frac{E_0}{\hbar}t + \frac{1}{2\hbar}x_0(t)p_0(t) \end{cases} \tag{84}$$

を導け．これにもとづき，確率密度 $\rho(x,t) = \psi^*(x,t)\psi(x,t)$ および確率の流れ $j(x,t) \equiv \frac{\hbar}{2mi}[\psi^*(x,t)\frac{\partial}{\partial x}\psi(x,t) - \frac{\partial}{\partial x}\psi^*(x,t)\psi(x,t)]$ の以下の表式を求めよ．

$$\rho(x,t) = \frac{\nu}{\sqrt{\pi}} e^{-\nu^2(x-x_0(t))^2} \quad , \qquad j(x,t) = \frac{p_0(t)}{m}\rho(x,t) \ . \tag{85}$$

(III-3-1) 球面調和関数の定義式

$$Y_l^m(\theta,\phi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}\frac{(l+m)!}{(l-m)!}}\frac{(-1)^l}{2^l l!}\left[e^{-i\phi}\left(-\frac{\partial}{\partial\theta} + i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\phi}\right)\right]^{l-m} e^{il\phi}(\sin\theta)^l \tag{86}$$

から表式

$$Y_l^m(\theta,\phi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}\frac{(l+m)!}{(l-m)!}} P_l^{-m}(\cos\theta) e^{im\phi} \tag{87}$$

を導こう．ここに $P_l^m(x)$ はルジャンドルの陪関数

$$P_l^m(x) = \frac{1}{2^l l!}(1-x^2)^{\frac{m}{2}}\frac{d^{l+m}}{dx^{l+m}}(x^2-1)^l \tag{88}$$

である．まず

$$\begin{aligned} X(\theta,\phi) &\equiv (-1)^l \left[e^{-i\phi}\left(-\frac{\partial}{\partial\theta} + i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\phi}\right)\right]^{l-m} e^{il\phi}(\sin\theta)^l \\ &= (-1)^l e^{im\phi}\left(-\frac{\partial}{\partial\theta} - (m+1)\cot\theta\right)\left(-\frac{\partial}{\partial\theta} - (m+2)\cot\theta\right)\cdots\left(-\frac{\partial}{\partial\theta} - l\cot\theta\right)(\sin\theta)^l \end{aligned}$$

を導け．$\cos\theta \equiv x$ とおくと

$$-\frac{\partial}{\partial\theta} - n\cot\theta = \sqrt{1-x^2}\frac{d}{dx} - \frac{nx}{\sqrt{1-x^2}} = (1-x^2)^{\frac{1-n}{2}}\frac{d}{dx}(1-x^2)^{\frac{n}{2}} \tag{89}$$

が成り立つことを確かめよ．これをもちいて

$$X(\theta,\phi) = e^{im\phi}(1-x^2)^{-\frac{m}{2}}\frac{d^{l-m}}{dx^{l-m}}(x^2-1)^l \tag{90}$$

を示すと求める表式が得られる．証明はしないが $P_l^m(x)$，$P_l^{-m}(x)$ はともにルジャンドルの陪微分方程式 $\left[(1-x^2)\frac{d^2}{dx^2} - 2x\frac{d}{dx} + l(l+1) - \frac{m^2}{1-x^2}\right]f(x) = 0$ の $-1 \le x \le 1$ で有限な解だから両者は定数係数で結び付く．x の最高巾の項の係数を比較することにより

$$P_l^{-m}(x) = (-1)^m\frac{(l-m)!}{(l+m)!}P_l^m(x) \tag{91}$$

を導け．したがって $Y_l^m(\theta,\phi)$ は

$$Y_l^m(\theta,\phi) = (-1)^m \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}\frac{(l-m)!}{(l+m)!}} P_l^m(\cos\theta) e^{im\phi} \tag{92}$$

と表される．

(III-4-1) 一様一定な磁場 $\vec{B} = (0,0,B)$ 中の，大きさ s のスピン $\hat{\vec{S}}$ の運動をハイゼンベルグ描像で考察しよう．ハミルトニアン，およびハイゼンベルグ方程式は

$$\hat{H} = -\frac{\mu B}{s\hbar}\hat{S}_z \ , \qquad \frac{d}{dt}\hat{\vec{S}}(t) = \frac{1}{i\hbar}[\hat{\vec{S}}(t), \hat{H}] = -\frac{\mu B}{is\hbar^2}[\hat{\vec{S}}(t), \hat{S}_z(t)] \ , \tag{93}$$

μ はスピン磁気モーメントである．$\omega = \frac{\mu B}{s\hbar}$ (ラーマー角速度) とおいて $\hat{\vec{S}}(t)$ の運動方程式

$$\frac{d}{dt}\hat{S}_x(t) = \omega\hat{S}_y(t) \ , \quad \frac{d}{dt}\hat{S}_y(t) = -\omega\hat{S}_x(t) \ , \quad \frac{d}{dt}\hat{S}_z(t) = 0 \tag{94}$$

を導け．これらを初期条件 $\hat{\vec{S}}(0) = \hat{\vec{S}}$ のもとに解いて以下の解を求めよ．

$$\hat{S}_x(t) = \hat{S}_x\cos\omega t + \hat{S}_y\sin\omega t \ , \quad \hat{S}_y(t) = \hat{S}_y\cos\omega t - \hat{S}_x\sin\omega t \ , \quad \hat{S}_z(t) = \hat{S}_z \ . \tag{95}$$

ハイゼンベルグ描像では，時刻 t における $\hat{\vec{S}}$ の期待値 $\langle\vec{S}(t)\rangle$ は，(95) の各演算子の $|\psi(0)\rangle$ についての期待値で与えられる．$\langle\vec{S}\rangle \equiv \langle\psi(0)|\hat{\vec{S}}|\psi(0)\rangle$ とすると，$\langle\vec{S}(t)\rangle$ は，ベクトル $\langle\vec{S}\rangle$ を z-軸を回転軸として角速度 ω で左回りに回転したものになる．

(III-5-1) $s_a = s_b = 1/2$ の 2 スピン系のハミルトニアンを

$$\hat{H} = \kappa\hat{\vec{S}}^a\cdot\hat{\vec{S}}^b \tag{96}$$

とする．$t=0$ に状態が $|\psi(0)\rangle = |+\rangle_a|-\rangle_b = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1,0\rangle + |0,0\rangle)$ であったとき，時刻 t の状態 $|\psi(t)\rangle$ は合成スピンのエネルギー $E_1 = \frac{1}{4}\kappa\hbar^2$，$E_0 = -\frac{3}{4}\kappa\hbar^2$ により

$$|\psi(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\frac{1}{\sqrt{2}}(|1,0\rangle + |0,0\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1,0\rangle e^{-\frac{i}{\hbar}E_1 t} + |0,0\rangle e^{-\frac{i}{\hbar}E_0 t}) \tag{97}$$

で与えられる．時刻 t に状態が $|+\rangle_a|-\rangle_b = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1,0\rangle + |0,0\rangle)$ である確率振幅

$$A(t) = \frac{1}{2}(\langle 1,0| + \langle 0,0|)(|1,0\rangle e^{-\frac{i}{\hbar}E_1 t} + |0,0\rangle e^{-\frac{i}{\hbar}E_0 t}) = e^{-\frac{i}{2\hbar}(E_1+E_0)t}\cos\frac{(E_1-E_0)t}{2\hbar} \tag{98}$$

を導け．また，$|\psi(t)\rangle$ が

$$|\psi(t)\rangle = |+\rangle_a|-\rangle_b\frac{1}{2}(e^{-\frac{i}{\hbar}E_1 t} + e^{-\frac{i}{\hbar}E_0 t}) + |-\rangle_a|+\rangle_b\frac{1}{2}(e^{-\frac{i}{\hbar}E_1 t} - e^{-\frac{i}{\hbar}E_0 t}) \tag{99}$$

と表されることを確かめ，これにもとづいて $|\psi(t)\rangle$ についての $\hat{S}_z^a$ の期待値

$$\langle S_z^a(t)\rangle = \langle\psi(t)|\hat{S}_z^a|\psi(t)\rangle = \frac{\hbar}{2}\cos\left(\frac{1}{\hbar}(E_1 - E_0)t\right) \tag{100}$$

を導け．

(III-6-1) スピン $1/2$ の粒子の軌道角運動量 $\hat{\mathbf{L}}$ とスピン角運動量 $\hat{\mathbf{S}}$ の合成 $\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{L}} + \hat{\mathbf{S}}$ を考察する．軌道角運動量の大きさを l とすると，合成角運動量の大きさは $j = l + 1/2$ と $j = l - 1/2$ ($l = 0$ のときは $j = 1/2$ のみ) である．軌道角運動量が $\hat{L}_z|l,l\rangle = \hbar l|l,l\rangle$、スピン角運動量が $\hat{S}_z|+\rangle = \hbar 1/2|+\rangle$ の状態 $|l,l\rangle|+\rangle$ は $\hat{J}_z = \hat{L}_z + \hat{S}_z$ の最大固有値 $(l+1/2)\hbar$ をもつので $j = l + 1/2$ の状態 $|l+1/2, l+1/2\rangle = |l,l\rangle|+\rangle$ である．この状態に下降演算子を $j - m$ 回作用し，2 項展開をすることにより

$$\begin{aligned} |l+1/2, m\rangle &= \sqrt{\frac{(j+m)!}{(2j)!(j-m)!}} \left(\frac{\hat{L}_- + \hat{S}_-}{\hbar}\right)^{j-m} |l,l\rangle|+\rangle \qquad j = l + 1/2 \\ &= \sqrt{\frac{(j+m)!}{(2j)!(j-m)!}} \sum_{r=0}^{j-m} \frac{(j-m)!}{r!(j-m-r)!} \left(\frac{\hat{L}_-}{\hbar}\right)^{j-m-r} |l,l\rangle \left(\frac{\hat{S}_-}{\hbar}\right)^{r} |+\rangle \end{aligned} \tag{101}$$

となる．$\hat{S}_-|+\rangle = \hbar|-\rangle$, $(\hat{S}_-)^r|+\rangle = 0$ $(r \geq 2)$ なので r の和は $r = 0, 1$ のみである．$\hat{L}_-$ の指数は $j - m - r = l - (m + r - 1/2)$ だから

$$\left(\frac{\hat{L}_-}{\hbar}\right)^{l-(m+r-1/2)} |l,l\rangle = \sqrt{\frac{(2l)!(l-(m+r-1/2))!}{(l+(m+r-1/2))!}} |l, m+r-1/2\rangle \tag{102}$$

である．これから

$$|l+1/2, m\rangle = \sqrt{\frac{l+1/2+m}{2l+1}}\ |l, m-1/2\rangle|+\rangle + \sqrt{\frac{l+1/2-m}{2l+1}}\ |l, m+1/2\rangle|-\rangle \tag{103}$$

を導け．$j = l - 1/2$ の状態は $|l+1/2, m\rangle$ と直交する状態

$$|l-1/2, m\rangle = \sqrt{\frac{l+1/2-m}{2l+1}}\ |l, m-1/2\rangle|+\rangle - \sqrt{\frac{l+1/2+m}{2l+1}}\ |l, m+1/2\rangle|-\rangle \tag{104}$$

となる．この状態が $\hat{J}_\pm|j,m\rangle = \hbar\sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)}|j, m \pm 1\rangle$ $(j = l - 1/2)$ を満たしていることを確かめよ．

(III-6-2) スピン角運動量 $\hat{\mathbf{S}}$ $(s = 1/2)$ と軌道角運動量 $\hat{\mathbf{L}}$ (l) の合成系において，全角運動量を $\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{L}} + \hat{\mathbf{S}}$ とする．系のハミルトニアンが

$$\hat{H} = g\hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{S}} \tag{105}$$

のとき

$$\left[\hat{H}, \hat{\mathbf{J}}\right] = 0,\ \left[\hat{H}, \hat{\mathbf{L}}^2\right] = 0,\ \left[\hat{H}, \hat{\mathbf{S}}^2\right] = 0 \tag{106}$$

が成り立つことを確かめよ．$\hat{\mathbf{L}}, \hat{\mathbf{S}}$ は保存量ではないが $\hat{\mathbf{J}}, \hat{\mathbf{L}}^2, \hat{\mathbf{S}}^2$ は保存量である．全角運動量の大きさは $j = l + 1/2$ と $j = l - 1/2$ の 2 通りである（$l = 0$ の場合は $j = 1/2$ のみ）．$\hat{\mathbf{J}}^2 = \hat{\mathbf{L}}^2 + \hat{\mathbf{S}}^2 + 2\hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{S}}$ により，それぞれの場合のエネルギー固有値

$$E(j = l + \frac{1}{2}) = \frac{\hbar^2 g}{2}\ l\ ,\quad E(j = l - \frac{1}{2}) = -\frac{\hbar^2 g}{2}\ (l+1) \tag{107}$$

を導け.

(III-7-1) 物理量 $\hat{F}$ を，全角運動量 $\hat{\mathbf{J}} = (\hat{J}_x, \hat{J}_y, \hat{J}_z)$ と可換な演算子

$$\left[\hat{F}, \hat{\mathbf{J}}\right] = 0 \tag{108}$$

とする．$\hat{\mathbf{J}}^2$ と $\hat{J}_z$ の同時固有状態

$$\hat{\mathbf{J}}^2|j,m\rangle = \hbar^2 j(j+1)|j,m\rangle \ , \quad \hat{J}_z|j,m\rangle = \hbar m|j,m\rangle \tag{109}$$

について，$\hat{F}$ の行列要素が

$$\langle j',m'|\hat{F}|j,m\rangle = f(j)\delta_{j'j}\delta_{m'm} \tag{110}$$

と表わされ，係数 $f(j)$ が量子数 m には依存しないこと (Wigner-Eckart の定理) を証明せよ．手順はまず，$\left[\hat{F},\hat{\mathbf{J}}^2\right]=0$ と $\left[\hat{F},\hat{J}_z\right]=0$ より行列要素の対角性 $\delta_{j'j}\delta_{m'm}$ を導き，つぎに $\left[\hat{F},\hat{J}_\pm\right]=0$ より $f(j)$ の m 不依存性を導く．$\hat{J}_\pm^\dagger=\hat{J}_\mp$ による $\langle j',m'|\hat{J}_\pm = \left(\hat{J}_\mp|j',m'\rangle\right)^\dagger$ に注意すること。

(III-7-2) ベクトル演算子 $\hat{\mathbf{v}} = (\hat{v}_x,\hat{v}_y,\hat{v}_z)$ を $V \equiv \{\ \hat{\mathbf{x}}\ ,\ \hat{\mathbf{p}}\ ,\ \hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{x}}\times\hat{\mathbf{p}}\ ,\ \hat{\mathbf{S}}\ ,\ \hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{L}}+\hat{\mathbf{S}}\ \}$ のいずれかとする。$\hat{\mathbf{J}}$ と $\hat{\mathbf{v}}$ の交換関係

$$[\hat{J}_i,\hat{v}_j] = i\hbar\sum_{k=x,y,z}\epsilon_{ijk}\hat{v}_k\ , \qquad [\hat{\mathbf{J}},\hat{\mathbf{v}}\cdot\hat{\mathbf{v}}'] = 0 \tag{111}$$

がすべての $\hat{\mathbf{v}},\hat{\mathbf{v}}' \in V$ について成り立つことを確かめよ。ここに $\epsilon_{xyz} = \epsilon_{yzx} = \epsilon_{zxy} = -\epsilon_{yxz} = -\epsilon_{zyx} = -\epsilon_{xzy} = 1$(他は$\epsilon_{ijk}=0$) は 3 階の完全反対称テンソル（レビ · チビタ記号）である。

(IV-3-1) 1 次元調和振動子 $\hat{H}_0 = \hbar\omega(\hat{a}^\dagger\hat{a}+1/2)$ に摂動

$$\lambda\hat{V} = \lambda\hbar\omega\cos\mu(\hat{a}+\hat{a}^\dagger) \tag{112}$$

が加わった系において，エネルギー固有値 E_n $(n=0,1,2,\cdots)$ への 1 次の補正

$$\Delta E_n = \lambda\hbar\omega\langle n|\cos\mu(\hat{a}+\hat{a}^\dagger)|n\rangle \equiv \lambda\hbar\omega F_n(\mu^2) \tag{113}$$

がラゲール (Laguerre) の多項式 $L_n(x)$ により

$$F_n(x) = e^{-\frac{1}{2}x}L_n(x) \ \ ; \qquad L_n(x) \equiv \frac{e^x}{n!}\frac{d^n}{dx^n}(e^{-x}x^n) \tag{114}$$

で与えられることを導こう．

方針はまず，$\langle n|\sin\mu(\hat{a}+\hat{a}^\dagger)|n\rangle = 0$ を確認し，さらに公式 [IV] の (15) 式を使うことにより

$$F_n(\mu^2) = \langle n|e^{i\mu(\hat{a}+\hat{a}^\dagger)}|n\rangle = e^{\frac{1}{2}\mu^2}\langle n|e^{i\mu\hat{a}}e^{i\mu\hat{a}^\dagger}|n\rangle \tag{115}$$

を示す．ここで $e^{i\mu\hat{a}}$ と $e^{i\mu\hat{a}^\dagger}$ を巾展開したとき，対角行列要素に寄与するのは $\hat{a}$ と $\hat{a}^\dagger$ の同次の項のみだから

$$F_n(\mu^2) = e^{\frac{1}{2}\mu^2}\sum_{l=0}^{\infty}\frac{(-\mu^2)^l}{l!l!}\langle n|(\hat{a})^l(\hat{a}^\dagger)^l|n\rangle \tag{116}$$

となる．$(\hat{a}^\dagger)^l|n\rangle$ は $|n+l\rangle$ に比例しており，比例係数は規格化から

$$(\hat{a}^\dagger)^l|n\rangle = \sqrt{\frac{(n+l)!}{n!}}|n+l\rangle \tag{117}$$

と定まるので，この式及びその共役式をもちいると

$$F_n(\mu^2) = e^{\frac{1}{2}\mu^2} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(n+l)!}{l!l!n!} (-\mu^2)^l \tag{118}$$

が得られる．以下のようにして級数の和をとると最終結果が求まる．

$$F_n(x) = e^{\frac{1}{2}x} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{1}{l!n!} (-1)^n \frac{d^n}{dx^n} (-x)^{n+l} = e^{\frac{1}{2}x} \frac{1}{n!} (-1)^n \frac{d^n}{dx^n} \Big((-x)^n e^{-x} \Big) = e^{-\frac{1}{2}x} L_n(x) \tag{119}$$

(113) の第２式と第３式を μ^2 で展開することにより，摂動として単項式

$$\lambda \hat{V}^{(N)} = \lambda \hbar \omega (\hat{a} + \hat{a}^\dagger)^{2N}/(2N)! \tag{120}$$

を加えたときの１次の補正 $\Delta E_n^{(N)}$ が，$F_n(x)$ の展開 $F_n(x) \equiv \sum_{N=0}^{\infty} (-1)^N f_n^{(N)} x^N$ の展開係数 $f_n^{(N)}$ により

$$\Delta E_n^{(N)} = \lambda \hbar \omega f_n^{(N)} \tag{121}$$

と求まる．$f_n^{(N)}$ の表式

$$f_n^{(N)} = \sum_{l=0}^{N} \left(-\frac{1}{2} \right)^{N-l} \frac{(n+l)!}{l!l!(N-l)!n!} \tag{122}$$

$$f_n^{(0)} = 1 \ , \quad f_n^{(1)} = n + \frac{1}{2} \ , \quad f_n^{(2)} = \frac{1}{8}(2n^2 + 2n + 1) \ , \ \cdots \tag{123}$$

を導け．n が大きい高励起状態への補正は $f_{n\to\infty}^{(N)} \sim n^N/(N!N!)$ で増大する．したがって n の大きな領域で，$N \geq 2$ の摂動の１次の補正 $\Delta E_n^{(N)}$ は 0 次の値 $E_n = \hbar\omega(n+1/2)$ より大きくなり摂動展開は破綻する．一方，この問題で取り扱っている摂動 (112) においては，１次の補正 (113) はすべての n に対して有限である．なぜ単項式の摂動展開が高励起状態で破綻するのか，その物理的理由を考察せよ．

(IV-3-2) 大きさが s のスピン系 $\hat{S}_z|m\rangle = \hbar m|m\rangle$ $(m = -s, \cdots, s)$ のハミルトニアンを

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \lambda \hat{V} \tag{124}$$

$$\hat{H}_0 = \frac{A}{\hbar} \hat{S}_z \ , \quad \hat{V} = \frac{a}{2\hbar}(\hat{S}_+ + \hat{S}_-) = \frac{a}{\hbar} \hat{S}_x \tag{125}$$

とする．λ の２次までの摂動でエネルギー固有値

$$E_m(\lambda) = mA + \lambda^2 m \frac{a^2}{2A} \tag{126}$$

を導け．また公式集の公式 [I] の (7) と角運動量の代数により

$$\hat{S}_\theta \equiv e^{-i\frac{\theta}{\hbar}\hat{S}_y} \hat{S}_z e^{i\frac{\theta}{\hbar}\hat{S}_y} = \hat{S}_z \cos\theta + \hat{S}_x \sin\theta \tag{127}$$

が成り立つことを確かめよ．したがって $e^{-i\frac{\theta}{\hbar}\hat{S}_y}|m\rangle$ は $\hat{S}_\theta$ の固有値 $\hbar m$ の固有ベクトルである．これをもとに $\hat{H}$ の厳密な固有値

$$E_m(\lambda) = m\sqrt{A^2 + \lambda^2 a^2} \tag{128}$$

を導き (126) と比較せよ．

(IV-4-1) スピン · スピン相互作用をしている２個のスピン 1/2 の系のハミルトニアン

$$\hat{H}_0 = \kappa \hat{\vec{S}}^a \cdot \hat{\vec{S}}^b \tag{129}$$

の固有ベクトルは，合成スピンが 0 で固有値 $E_0 = -\frac{3}{4}\kappa\hbar^2$ の $|0,0\rangle$ と，合成スピンが 1 で固有値 $E_1 = \frac{1}{4}\kappa\hbar^2$ の３重縮退した $\{\alpha\} = \{|1,1\rangle, |1,0\rangle, |1,-1\rangle\}$ であった．この系に摂動として磁場 $\vec{B}$ を加えハミルトニアンを

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \lambda\hat{V} \quad : \qquad \hat{V} = -\frac{2\mu_a}{\hbar}\hat{\vec{S}}^a \cdot \vec{B} - \frac{2\mu_b}{\hbar}\hat{\vec{S}}^b \cdot \vec{B} \tag{130}$$

とする．固有値の摂動展開を λ の２次まで求めよう．

縮退のある場合の摂動計算を行うためには，摂動 $\hat{V}$ の $\{\alpha\}$ 空間の中での行列要素が対角になるように $\{\alpha\}$ 空間の基底をとらなければならないが，$\langle 1,m|\hat{V}|1,n\rangle$ は一般には対角行列ではない．たとえば，磁場が $\vec{B} = (B,0,0)$ だと $\hat{V} \sim \hat{S}_x \sim \hat{S}_+ + \hat{S}_-$ となり，行列要素は対角にはなりえない．ここで，$\hat{H}_0$ は回転対称だから，磁場の向きをどうとるかは単なる約束ごとになっていることに注目しよう．そこで，$\vec{B} = (0,0,B)$ とすると $\hat{V}$ は

$$\hat{V} = -a\hat{S}^a_z - b\hat{S}^b_z \quad : \qquad a = \frac{2\mu_a}{\hbar}B \ , \quad b = \frac{2\mu_b}{\hbar}B \tag{131}$$

である．以下の $\hat{V}$ の作用

$$\hat{V}|1,\pm1\rangle = -(a\hat{S}^a_z + b\hat{S}^b_z)|\pm\rangle_a|\pm\rangle_b = \mp\frac{\hbar}{2}(a+b)|1,\pm1\rangle \ , \tag{132}$$

$$\hat{V}|1,0\rangle = -(a\hat{S}^a_z + b\hat{S}^b_z)\frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle_a|-\rangle_b + |-\rangle_a|+\rangle_b) = -\frac{\hbar}{2}(a-b)|0,0\rangle \ , \tag{133}$$

$$\hat{V}|0,0\rangle = -(a\hat{S}^a_z + b\hat{S}^b_z)\frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle_a|-\rangle_b - |-\rangle_a|+\rangle_b) = -\frac{\hbar}{2}(a-b)|1,0\rangle \tag{134}$$

を導け．したがって，$\{\alpha\}$ 空間の $\hat{V}$ の行列要素は

$$\langle 1,m|\hat{V}|1,n\rangle = -\frac{\hbar}{2}(a+b)m\delta_{mn} \ , \qquad m,n = -1,0,1 \tag{135}$$

となり対角行列が実現されている．固有値への λ の１次の補正

$$E^{(1)}_{1,m} = \langle 1,m|\hat{V}|1,m\rangle = -\frac{\hbar}{2}(a+b)m \ , \tag{136}$$

$$E^{(1)}_{0,0} = \langle 0,0|\hat{V}|0,0\rangle = 0 \tag{137}$$

を確かめよ．さらに，λ の２次の補正

$$E^{(2)}_{1,m} = -\sum_{l\notin\{\alpha\}}\frac{|\langle l|\hat{V}|1,m\rangle|^2}{E_l - E_1} = \frac{(a-b)^2}{4\kappa}\delta_{m,0} \ , \tag{138}$$

$$E^{(2)}_{0,0} = -\sum_{l\neq 0}\frac{|\langle l|\hat{V}|0,0\rangle|^2}{E_l - E_0} = -\frac{(a-b)^2}{4\kappa} \tag{139}$$

を導け．したがって摂動展開は以下のとおりである．

$$E_{0,0}(\lambda) = -\frac{3}{4}\kappa\hbar^2 - \lambda^2\frac{(a-b)^2}{4\kappa} + O(\lambda^3) \ , \tag{140}$$

$$E_{1,m}(\lambda) = \frac{1}{4}\kappa\hbar^2 - \lambda\frac{\hbar}{2}(a+b)m + \lambda^2\frac{(a-b)^2}{4\kappa}\delta_{m,0} + O(\lambda^3) \ . \tag{141}$$

(IV-6-1) スピン磁気共鳴の Rabi の公式を求めよう．ハミルトニアンを $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}(t)$ とし，$\hat{H}_0$ の固有ベクトルを

$$\hat{H}_0|\pm\rangle = E_\pm|\pm\rangle\ , \qquad E_\pm = \mp\frac{\hbar}{2}A \tag{142}$$

とする．$\hat{V}(t)$ の行列要素は

$$\langle\mp|\hat{V}(t)|\pm\rangle = -\hbar a e^{\mp i\omega t}\ ,\quad \langle\pm|\hat{V}(t)|\pm\rangle = 0 \tag{143}$$

である．時刻 t の状態を

$$|\psi(t)\rangle = |+\rangle C_+(t)e^{-\frac{i}{\hbar}E_+t} + |-\rangle C_-(t)e^{-\frac{i}{\hbar}E_-t} \tag{144}$$

と表す．$C_\pm(t)$ が満たす微分方程式

$$i\hbar\frac{d}{dt}C_+(t) = -\hbar a e^{-iAt}e^{i\omega t}C_-(t) \tag{145}$$
$$i\hbar\frac{d}{dt}C_-(t) = -\hbar a e^{iAt}e^{-i\omega t}C_+(t) \tag{146}$$

を導け．この微分方程式を初期条件 $C_+(0) = 1, C_-(0) = 0$ のもとに解くことにする．

これらの式からまず

$$\frac{d^2}{dt^2}C_-(t) - i(A-\omega)\frac{d}{dt}C_-(t) + a^2C_-(t) = 0 \tag{147}$$

を導け．$C_- \equiv e^{i\alpha t}$ とおくと特性方程式から $\alpha = (A-\omega)/2 \pm \sqrt{a^2 + ((A-\omega)/2)^2}$ が求まる．初期条件 $C_-(t=0) = 0$ により γ を定数として

$$C_-(t) = \gamma e^{i\frac{A-\omega}{2}t}\sin\sqrt{a^2 + \left(\frac{A-\omega}{2}\right)^2}\ \ t \tag{148}$$

を導け．初期条件 $C_+(t=0) = 1$ を (146) に課すことにより

$$\gamma = \frac{ia}{\sqrt{a^2 + \left(\frac{A-\omega}{2}\right)^2}} \tag{149}$$

を導け．これで Rabi の公式

$$P_-(t) \equiv |C_-(t)|^2 = \frac{a^2}{a^2 + \left(\frac{A-\omega}{2}\right)^2}\sin^2\sqrt{a^2 + \left(\frac{A-\omega}{2}\right)^2}\ \ t \tag{150}$$

が求まった．

(V-2-1) 散乱問題のグリーン関数 $G^{(\pm)}(\mathbf{x}-\mathbf{y})$ を求めよう．$G^{(\pm)}(\mathbf{x})$ は方程式

$$(p^2 - \tilde{\mathbf{p}}^2)G^{(\pm)}(\mathbf{x}) = \delta^3(\mathbf{x})\ \ ,\quad \tilde{\mathbf{p}} \equiv -i\hbar\frac{\partial}{\partial\mathbf{x}} \tag{151}$$

を満たす．デルタ関数の公式 $\delta^3(\mathbf{x}) = \int\frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi\hbar)^3}\ e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}$ にもとづき，

$$G^{(\pm)}(\mathbf{x}) = \int\frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi\hbar)^3}\frac{1}{p^2 - \mathbf{k}^2 \pm i\epsilon}\ e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \tag{152}$$

が (151) を満たすことを確かめよ．$\mathbf{x}$ の方向を z 軸にとって $\mathbf{k}$ を極座標で表すと $\mathbf{k}\cdot\mathbf{x} = kr\cos\theta$ である．$\int d^3\mathbf{k} = \int_0^{2\pi} d\phi \int_{-1}^{1} d\cos\theta \int_0^\infty k^2 dk$ の積分の $d\phi\ d\cos\theta$ を実行し

$$G^{(\pm)}(\mathbf{x}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^2}\frac{1}{ir}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{kdk}{p^2-k^2\pm i\epsilon}e^{\frac{i}{\hbar}kr} \tag{153}$$

を導け．被積分関数に $e^{\frac{i}{\hbar}kr}$ があるので，dk の積分は複素 k 面で ∞ から反時計回りに上半面を回り $-\infty$ にもどってくる閉じた積分路 C に拡張することができる．C に囲まれた k の極が $G^{(+)}$ では $k = p + i\epsilon$，$G^{(-)}$ では $k = -p + i\epsilon$ となり，それぞれの留数が

$$2\pi i\frac{p}{-2p}e^{\frac{i}{\hbar}pr} \quad , \quad 2\pi i\frac{-p}{2p}e^{-\frac{i}{\hbar}pr} \tag{154}$$

となることを確かめよ．したがってグリーン関数は以下のように求まる．

$$G^{(\pm)}(\mathbf{x}) = -\frac{1}{4\pi\hbar^2}\frac{e^{\pm\frac{i}{\hbar}pr}}{r} \tag{155}$$

(V-4-1) 球ベッセルの微分方程式

$$\mathcal{L}_l f_l(x) = 0 \qquad ; \ \mathcal{L}_l \equiv \frac{1}{x}\frac{d^2}{dx^2}x - \frac{l(l+1)}{x^2} + 1 \tag{156}$$

を解こう．$l = 0$ のときは $\frac{d^2}{dx^2}(xf_0) + xf_0 = 0$ だから

$$f_0(x) \sim \frac{\sin x}{x}\ , \quad \frac{\cos x}{x} \tag{157}$$

である．$\mathcal{D} \equiv \frac{d}{dx} + \frac{1}{x} = \frac{1}{x}\frac{d}{dx}x$ を定義すると $[\mathcal{D}, \frac{1}{x}] = -\frac{1}{x^2}$ である．$\mathcal{L}_l$ が

$$\begin{aligned}\mathcal{L}_l &= \left(\mathcal{D} - \frac{l}{x}\right)\left(\mathcal{D} + \frac{l}{x}\right) + 1 \\ &= \left(\mathcal{D} + \frac{l+1}{x}\right)\left(\mathcal{D} - \frac{l+1}{x}\right) + 1\end{aligned} \tag{158}$$

と表されることを確かめよ．これをもとに

$$\left(\mathcal{D} - \frac{l}{x}\right)\mathcal{L}_{l-1} = \mathcal{L}_l\left(\mathcal{D} - \frac{l}{x}\right)\ , \quad \left(\mathcal{D} + \frac{l}{x}\right)\mathcal{L}_l = \mathcal{L}_{l-1}\left(\mathcal{D} + \frac{l}{x}\right) \tag{159}$$

が成り立つことを示せ．よって $f_{l-1}(x)$ が $\mathcal{L}_{l-1}f_{l-1}(x) = 0$ の解であれば $f_l(x) \equiv -\left(\mathcal{D} - \frac{l}{x}\right)f_{l-1}(x)$ は $\mathcal{L}_l f_l(x) = 0$ の解である．$\left(\mathcal{D} + \frac{l}{x}\right)f_l(x) = f_{l-1}(x)$ が成り立つことも確かめよ．したがって $f_l(x)$ は

$$f_l(x) = (-1)^l\left(\mathcal{D} - \frac{l}{x}\right)\left(\mathcal{D} - \frac{l-1}{x}\right)\cdots\left(\mathcal{D} - \frac{1}{x}\right)f_0(x) \tag{160}$$

と求まる．$\mathcal{D} - \frac{l}{x} = \frac{d}{dx} - \frac{l-1}{x} = x^{l-1}\frac{d}{dx}x^{-(l-1)}$ に着目して

$$f_l(x) = (-1)^l x^l\left(\frac{1}{x}\frac{d}{dx}\right)^l f_0(x) \tag{161}$$

を導け．$f_0(x) = \frac{\sin x}{x}$ とおくと球ベッセル関数 $j_l(x)$，$f_0(x) = -\frac{\cos x}{x}$ とおくと球ノイマン関数 $n_l(x)$ である．$x \to 0$ の振る舞いは $j_l(x)$ は $f_0(x)$ の x^{2l} の項，$n_l(x)$ は x^{-1} の項で決ま

る．$j_l \pm i n_l$ の $x \to \infty$ の漸近形は $f_0(x) = -i\frac{e^{\pm ix}}{x}$ とおいて，微分が $e^{\pm ix}$ にかかったもので決まる．

(V-4-2) 平面波の展開公式

$$e^{ixy} = \sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)i^l j_l(y)P_l(x) \quad , \quad -1 \le x \le 1 \tag{162}$$

を証明しよう．ルジャンドル関数 $P_l(x) \equiv P_l^0(x)$ は $-1 \le x \le 1$ で完全系をなし直交性 $\int_{-1}^{1} P_l(x)P_n(x)dx = \frac{2}{2l+1}\delta_{ln}$ を満たす．したがって

$$\int_{-1}^{1} e^{ixy}P_l(x)dx = 2i^l j_l(y) \tag{163}$$

が示せればよい．数学的帰納法にしたがって証明をすすめる．まず，$l=0$ でこの式が成り立っていることを確かめよ．つぎに l でこの式が成り立っているとする．問題 (V-4-2) により $j_l(y)$ は $(\frac{d}{dy} - \frac{l}{y})j_l(y) = -j_{l+1}(y)$ を満たすので，(163) が $l+1$ で成り立つための条件は

$$\left(\frac{d}{dy} - \frac{l}{y}\right)\int_{-1}^{1} e^{ixy}P_l(x)dx = i\int_{-1}^{1} e^{ixy}P_{l+1}(x)dx \tag{164}$$

である．ロドリグの公式 $P_l(x) = (2^l l!)^{-1}\frac{d^l}{dx^l}(x^2-1)^l$ を代入して部分積分を行なうことによりこの等式を確かめよ．

付録　散乱セミナー　(自主ゼミ用)

ハミルトニアンが $\hat{H}=\hat{H}_0+\hat{V}$ $(\hat{H}_0\equiv\frac{1}{2m}\hat{\mathbf{p}}^2)$ の系の散乱過程を，相互作用描像 (§IV-7) で表現しよう．シュレディンガー描像の状態ベクトル $|\psi(t)\rangle_{\mathrm{S}}$ は運動方程式

$$i\hbar\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle_{\mathrm{S}}=\hat{H}|\psi(t)\rangle_{\mathrm{S}} \tag{1}$$

に従う．相互作用描像の状態ベクトル $|\psi(t)\rangle_{\mathrm{I}}$ はシュレディンガー描像の $|\psi(t)\rangle_{\mathrm{S}}$ から

$$|\psi(t)\rangle_{\mathrm{I}}=e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t}|\psi(t)\rangle_{\mathrm{S}} \tag{2}$$

で定義される．(1) から $|\psi(t)\rangle_{\mathrm{I}}$ の従う運動方程式が

$$i\hbar\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle_{\mathrm{I}}=\hat{V}_{\mathrm{I}}(t)|\psi(t)\rangle_{\mathrm{I}}\ ,\qquad \hat{V}_{\mathrm{I}}(t)\equiv e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t}\hat{V}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t} \tag{3}$$

と導かれる (この方程式は $\hat{V}$ に時間依存性があっても成立)．(3) を形式的に積分しよう．

$$|\psi(t)\rangle_{\mathrm{I}}=|\psi(t_0)\rangle_{\mathrm{I}}+\int_{t_0}^{t}\frac{dt_1}{i\hbar}\hat{V}_{\mathrm{I}}(t_1)|\psi(t_1)\rangle_{\mathrm{I}} \tag{4}$$

右辺第 2 項の $|\psi(t)\rangle_{\mathrm{I}}$ をこの表式全体で置き換える操作を逐次行なうと

$$\begin{aligned}|\psi(t)\rangle_{\mathrm{I}} &= \left(\hat{1}+\int_{t_0}^{t}\frac{dt_1}{i\hbar}\hat{V}_{\mathrm{I}}(t_1)+\int_{t_0}^{t}\frac{dt_2}{i\hbar}\hat{V}_{\mathrm{I}}(t_2)\int_{t_0}^{t_2}\frac{dt_1}{i\hbar}\hat{V}_{\mathrm{I}}(t_1)+\cdots\right)|\psi(t_0)\rangle_{\mathrm{I}}\\ &\equiv \hat{U}(t,t_0)|\psi(t_0)\rangle_{\mathrm{I}}\end{aligned} \tag{5}$$

が求まる．演算子 $\hat{U}(t,t_0)$ は，$|\psi(t)\rangle_{\mathrm{I}}=\hat{U}(t,t')|\psi(t')\rangle_{\mathrm{I}}=\hat{U}(t,t')\hat{U}(t',t_0)|\psi(t_0)\rangle_{\mathrm{I}}$ により，

$$\hat{U}(t,t')\hat{U}(t',t_0)=\hat{U}(t,t_0)\ ,\quad \hat{U}(t,t)=\hat{1}\ ,\quad \hat{U}(t',t)=\hat{U}(t,t')^{-1} \tag{6}$$

を満たす．さらに $\hat{V}_{\mathrm{I}}(t)$ のエルミート性 $\hat{V}_{\mathrm{I}}(t)^\dagger=\hat{V}_{\mathrm{I}}(t)$ により

$$\hat{U}(t,t_0)^\dagger=\hat{U}(t_0,t) \tag{7}$$

が $\hat{V}_{\mathrm{I}}(t)$ の各ベキごとに成り立つことが確かめられる．したがって，(6) の第 3 式により，$\hat{U}(t,t_0)$ はユニタリー演算子 $\hat{U}(t,t_0)^\dagger\hat{U}(t,t_0)=\hat{1}$ である．$\hat{U}(t,t_0)$ は時間推進演算子と呼ばれる．

準備はここまでにして，これから本題の散乱過程を考察しよう．(5) で，$t_0=-T/2,\ t=T/2$ とおいて $T\to\infty$ の極限をとった状態を

$$\lim_{T\to\infty}|\psi(-T/2)\rangle_{\mathrm{I}}\equiv|\psi_i\rangle\ ,\qquad \lim_{T\to\infty}|\psi(T/2)\rangle_{\mathrm{I}}\equiv|\psi_f\rangle \tag{8}$$

と定義しよう．散乱過程において，時刻 $t\to\pm\infty$ には，粒子は散乱標的から大きく遠ざかっているので $\hat{V}$ の力は及ばない．したがって (3) により $|\psi_i\rangle,|\psi_f\rangle$ には T 依存性はない．この極限で (5) を

$$|\psi_f\rangle=\hat{S}|\psi_i\rangle\ ,\qquad \hat{S}\equiv\lim_{T\to\infty}\hat{U}(T/2,-T/2) \tag{9}$$

と表そう．演算子 $\hat{S}$ は S 行列 (scattering matrix) と呼ばれる．$\hat{V}=0$ だと $\hat{S}=\hat{1}$ だから

$$\hat{S}=\hat{1}+i\hat{T} \tag{10}$$

と書くと，$\hat{T}$ は相互作用の効果を表しており，T 行列 (transition matrix) と呼ばれる．$\hat{S}$ のユニタリー性 $\hat{S}^\dagger\hat{S}=\hat{1}$ により確率の保存 $\langle\psi_f|\psi_f\rangle=\langle\psi_i|\psi_i\rangle$ が成り立ち，$\hat{T}$ は

$$-i(\hat{T}-\hat{T}^\dagger)=\hat{T}^\dagger\hat{T} \tag{11}$$

を満たす．

$|\psi_i\rangle$ も $|\psi_f\rangle$ も $\hat{H}_0=\frac{1}{2m}\hat{\mathbf{p}}^2$ で自由運動をしている状態である．その状態空間の基底ベクトルとして，運動量の固有ベクトル $\hat{\mathbf{p}}|\mathbf{p}\rangle=\mathbf{p}|\mathbf{p}\rangle$, $\langle\mathbf{p}'|\mathbf{p}\rangle=\delta^3(\mathbf{p}'-\mathbf{p})$ を用いよう．時刻 $t=-T/2$ に始状態が $|\mathbf{p}\rangle$ であったとしよう．時刻 $t=T/2$ に終状態が $|\mathbf{p}'\rangle$ に遷移している確率振幅は $\langle\mathbf{p}'|i\hat{T}|\mathbf{p}\rangle$ である．今採用している状態ベクトル $|\mathbf{p}\rangle$ の規格化のもとでは

$$\int d^3\mathbf{p}'\left|\langle\mathbf{p}'|\hat{S}|\mathbf{p}\rangle\right|^2=\int d^3\mathbf{p}'\langle\mathbf{p}|\hat{S}^\dagger|\mathbf{p}'\rangle\langle\mathbf{p}'|\hat{S}|\mathbf{p}\rangle=\langle\mathbf{p}|\mathbf{p}\rangle=\delta^3(\mathbf{p}-\mathbf{p}) \tag{12}$$

だから，終状態の全確率が 1 となるように確率を規格化したときの遷移確率は

$$dP=\frac{1}{\delta^3(\mathbf{p}-\mathbf{p})}\left|\langle\mathbf{p}'|\hat{T}|\mathbf{p}\rangle\right|^2 d^3\mathbf{p}' \tag{13}$$

と表される．遷移の過程でエネルギーは保存されるので $\hat{T}$ の行列要素はエネルギーの δ 関数を含む．それをあらわに出して

$$\langle\mathbf{p}'|\hat{T}|\mathbf{p}\rangle=\delta(E'-E)T(\mathbf{p}',\mathbf{p})\ ,\qquad E\equiv\frac{\mathbf{p}^2}{2m},\ \ E'\equiv\frac{\mathbf{p}'^2}{2m} \tag{14}$$

と書こう．(13) の中に現れる δ 関数の積は $\delta(E'-E)\delta(E'-E)=\delta(E-E)\delta(E'-E)$ なので，遷移確率 (13) は

$$dP=\frac{\delta(E-E)}{\delta^3(\mathbf{p}-\mathbf{p})}\left|T(\mathbf{p}',\mathbf{p})\right|^2\delta(E'-E)d^3\mathbf{p}' \tag{15}$$

となる．(15) に現れている $\delta(E-E)$, $\delta^3(\mathbf{p}-\mathbf{p})$ は発散量だから注意深く取り扱わなければならない．δ 関数の定義により，それらは

$$\delta^3(\mathbf{p}-\mathbf{p})=\int\frac{d^3\mathbf{x}}{(2\pi\hbar)^3}e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}-\mathbf{p})\cdot\mathbf{x}}=\left.\frac{V}{(2\pi\hbar)^3}\right|_{V\to\infty} \tag{16}$$

$$\delta(E-E)=\lim_{T\to\infty}\int_{-T/2}^{T/2}\frac{dt}{2\pi\hbar}e^{\frac{i}{\hbar}(E-E)t}=\left.\frac{T}{2\pi\hbar}\right|_{T\to\infty} \tag{17}$$

である．ここに V は全 3 次元体積である．さらに，

$$d^3\mathbf{p}'=p'^2dp'd\Omega\ ,\ \ \delta(E'-E)=\delta\left(\frac{(p'+p)(p'-p)}{2m}\right)=\frac{m}{p}\delta(p'-p) \tag{18}$$

をもちいて dp' についての積分を実行すると，遷移確率の最終表式として

$$dP=(2\pi\hbar)^2\frac{T}{V}\left|T(\mathbf{p}',\mathbf{p})\right|^2 mpd\Omega \tag{19}$$

が求まる．dP は始状態から終状態までの時間間隔 T の間に遷移する確率だから，単位時間当りの遷移確率 dw は

$$dw \equiv \frac{dP}{T} = \frac{(2\pi\hbar)^2}{V} \left|T(\mathbf{p}', \mathbf{p})\right|^2 mpd\Omega \tag{20}$$

である．

この遷移確率から散乱断面積を導こう．散乱断面積は，標的に向かって単位時間に単位断面積を通過する入射粒子の個数 N_i と，単位時間当りに立体角 $d\Omega$ の中に散乱される粒子の個数 dN_s の比

$$d\sigma \equiv \frac{dN_s}{N_i} \tag{21}$$

で定義される．始状態は全体積 V の中に 1 個の粒子が運動量 $\mathbf{p}$ をもって運動している状態だから，単位体積当りの個数は $1/V$ 個である．これに粒子の速度 $v = p/m$ をかけた $p/(mV)$ が入射粒子の N_i に相当する．この時の単位時間当りの散乱粒子の個数 dN_s は単位時間当りの遷移確率 $dw \times [\,1\text{ 個}]$ に相当している．したがって

$$d\sigma = \frac{dw}{\frac{p}{mV}} = |2\pi\hbar mT(\mathbf{p}', \mathbf{p})|^2 d\Omega \tag{22}$$

である．微分散乱断面積は

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\mathbf{p}', \mathbf{p})|^2 \ , \qquad f(\mathbf{p}', \mathbf{p}) \equiv 2\pi\hbar mT(\mathbf{p}', \mathbf{p}) \tag{23}$$

と表される．$f(\mathbf{p}', \mathbf{p})$ は散乱振幅である．

確率の保存の式 (11) の対角行列要素をとると

$$2\mathrm{Im}\langle\mathbf{p}|\hat{T}|\mathbf{p}\rangle = \int d^3\mathbf{p}'\langle\mathbf{p}|\hat{T}^\dagger|\mathbf{p}'\rangle\langle\mathbf{p}'|\hat{T}|\mathbf{p}\rangle \tag{24}$$

$$\begin{aligned}\delta(E-E)2\mathrm{Im}T(\mathbf{p}, \mathbf{p}) &= \delta(E-E)\int d^3\mathbf{p}'\delta(E'-E)|T(\mathbf{p}', \mathbf{p})|^2 \\ &= \delta(E-E)mp\int d\Omega|T(\mathbf{p}', \mathbf{p})|^2\end{aligned} \tag{25}$$

となる．これは，散乱振幅 $f(\mathbf{p}', \mathbf{p})$ で表すと，部分波展開の方法で導いた光学定理の式

$$\mathrm{Im}f(\mathbf{p}, \mathbf{p}) = \frac{p}{4\pi\hbar}\int d\Omega|f(\mathbf{p}', \mathbf{p})|^2 = \frac{p}{4\pi\hbar}\sigma_{\mathrm{Tot.}} \tag{26}$$

になっている．光学定理は，量子力学における確率の保存の法則を，散乱過程という物理現象の中で表現したものなのである．

(9) の $\hat{S}$ を $\hat{V}_{\mathrm{I}}$ について摂動展開すると，(10) の $\hat{T}$ の摂動の 1 次の項は

$$\hat{T}^{(1)} = -\frac{1}{\hbar}\lim_{T\to\infty}\int_{-T/2}^{T/2} dte^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t}\hat{V}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t} \tag{27}$$

である．行列要素をとると

$$\langle\mathbf{p}'|\hat{T}^{(1)}|\mathbf{p}\rangle = -\frac{1}{\hbar}\lim_{T\to\infty}\int_{-T/2}^{T/2} dte^{\frac{i}{\hbar}(E'-E)t}\langle\mathbf{p}'|\hat{V}|\mathbf{p}\rangle = -2\pi\delta(E'-E)\langle\mathbf{p}'|\hat{V}|\mathbf{p}\rangle \tag{28}$$

となる．これから摂動の 1 次での散乱振幅

$$\begin{aligned}f^{(1)}(\mathbf{p}', \mathbf{p}) &= -4\pi^2\hbar m\langle\mathbf{p}'|\hat{V}|\mathbf{p}\rangle \\ &= -4\pi^2\hbar m\int d^3\mathbf{x}\langle\mathbf{p}'|\mathbf{x}\rangle V(\mathbf{x})\langle\mathbf{x}|\mathbf{p}\rangle \\ &= -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int d^3\mathbf{x}e^{-\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}'-\mathbf{p})\cdot\mathbf{x}}V(\mathbf{x})\end{aligned} \tag{29}$$

が得られる．これはボルン近似の方法で導いた散乱振幅である．

この続きは井上の homepage に置いておく．