量子力学 II　演習問題 9

2018 年 7 月 23 日

1　相互作用描像

ハミルトニアンが次のような形で与えられる状況を考える。

$$\hat{H}(t) = \hat{H}_0 + \hat{V}(t)$$

$\hat{H}_0$ を非摂動ハミルトニアン、$\hat{V}(t)$ を摂動項とみなして、時間に依存した摂動論を適用する。ここで、相互作用描像を導入しよう。Schrödinger 描像における状態ケット $|\psi(t)\rangle$ と演算子 $\hat{O}(t)$ の相互作用描像における対応物はそれぞれ次のように定義される。

$$|\psi(t)\rangle = \exp\left(\frac{\hat{H}_0}{\mathrm{i}\hbar}t\right)|\psi(t)\rangle_I$$
$$\hat{O}_I(t) = \exp\left(-\frac{\hat{H}_0}{\mathrm{i}\hbar}t\right)\hat{O}(t)\exp\left(\frac{\hat{H}_0}{\mathrm{i}\hbar}t\right)$$

ここで、下付き添え字 $_I$ があるものが相互作用描像である。

(1) 次の等式を示せ。

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

(2) Schrödinger 描像における演算子 $\hat{O}(t)$ が時間に陽に依らない ($\hat{O}(t) = \hat{O}$) とき、次の等式を示せ。

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\hat{O}_I(t) = \left[\hat{O}_I(t), \hat{H}_0\right]$$

(3) (1) の結果を用いて次の等式を示せ。

$$|\psi(t)\rangle_I = \left(1 + \sum_{k=1}^{\infty}\left(\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\right)^k\int_{t_0}^{t}\mathrm{d}t_1\int_{t_0}^{t_1}\mathrm{d}t_2\cdots\int_{t_0}^{t_{k-1}}\mathrm{d}t_k\,\hat{V}_I(t_1)\cdots\hat{V}_I(t_k)\right)|\psi(t_0)\rangle_I$$

ここで、時間順序積または T 積と呼ばれる記号を導入する。時間に依存する演算子 $\hat{A}_1(t), \cdots, \hat{A}_n(t)$ に対して、それらの T 積は次のように定義される。

$$T\left[\hat{A}_1(t_1)\hat{A}_2(t_2)\cdots\hat{A}_n(t_n)\right] := \sum_p \theta(t_{p(1)} - t_{p(2)})\theta(t_{p(2)} - t_{p(3)})\cdots\theta(t_{p(n-1)} - t_{p(n)}) \cdot \hat{A}_{p(1)}(t_{p(1)})\hat{A}_{p(2)}(t_{p(2)})\cdots\hat{A}_{p(n)}(t_{p(n)})$$

ここで、p は集合 $\{1, 2, \cdots, n\}$ についての置換[1]であり、右辺における和はあらゆる置換 p に対して取る。また、$\theta(x)$ は Heaviside の階段関数[2]である。例えば、$n = 2$ のときには

$$T\left[\hat{A}_1(t_1)\hat{A}_2(t_2)\right] = \theta(t_1 - t_2)\hat{A}_1(t_1)\hat{A}_2(t_2) + \theta(t_2 - t_1)\hat{A}_2(t_2)\hat{A}_1(t_1)$$

である。T 積は時刻の引数が大きい順に演算子を並べ替える働きをする。

(4) (3) で示した式が T 積を用いて次のように表されることを示せ。

$$|\psi(t)\rangle_I = T\left[\exp\left(\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\int_{t_0}^{t} \mathrm{d}t'\,\hat{V}_I(t')\right)\right]|\psi(t_0)\rangle_I$$

(ヒント) $\hat{A}(t_1, t_2, \cdots, t_n) := T\left[\hat{V}_I(t_1)\hat{V}_I(t_2)\cdots\hat{V}_I(t_n)\right]$ とおくと、$\hat{A}(t_1, t_2, \cdots, t_n)$ は任意の 2 つの引数 t_i, t_j の交換に対して不変であることに注意せよ。

[1] $\{1, 2, \cdots, n\}$ から $\{1, 2, \cdots, n\}$ 自身への一対一対応 p を置換という。これは端的に言うと n 個の数字の並べ替えであり、$p(i)$ は並べ替え後の i 番目の数字だと考えればよい。

[2] Heaviside の階段関数は次のように定義される。

$$\theta(x) = \begin{cases} 1 & (x > 0) \\ 0 & (x < 0) \end{cases}$$

2　断熱定理

ハミルトニアンが次のような形で与えられる状況を考える。

$$\hat{H}(t) = \hat{H}_0 + \hat{V}(t)$$

$\hat{H}_0$ には縮退が無いとする。また、$\hat{V}(t)$ は t に対してゆっくりと変化し、$t \to \pm\infty$ において次のように一定の演算子に収束する。

$$\lim_{t\to-\infty} \hat{V}(t) = 0, \qquad \lim_{t\to\infty} \hat{V}(t) = \hat{V}_0$$

ここで、$\hat{V}_0$ は $\hat{H}_0$ に対して十分に小さいとする。$\hat{H}_0$ を非摂動ハミルトニアン、$\hat{V}(t)$ を摂動項とみなして、時間に依存した摂動論を適用する。$\hat{H}_0$ の固有値および対応する固有状態をそれぞれ $E_k^{(0)}, |\phi_k\rangle$ とする。また、$\hat{H}_0 + \hat{V}_0$ の固有値および対応する固有状態をそれぞれ $E_k, |\xi_k\rangle$ とする。$(k = 1, 2, \cdots)$

Schrödinger 描像における時刻 t での系の状態を $|\psi_n(t)\rangle$ とすると、$|\psi_n(t)\rangle$ の相互作用描像 $|\psi_n(t)\rangle_I$ は次の条件を満たす。

$$\lim_{t\to-\infty} |\psi_n(t)\rangle_I = |\phi_n\rangle$$

ここで[3]、$|\psi_n(t)\rangle_I$ を、$\{|\phi_k\rangle\}$ を用いて次のように展開する。

$$|\psi_n(t)\rangle_I = \sum_k c_k(t)\,|\phi_k\rangle$$

但し、一般に Schrödinger 描像における状態ケット $|\psi(t)\rangle$ と演算子 $\hat{O}(t)$ の相互作用描像における対応物はそれぞれ次のように定義される。

$$|\psi(t)\rangle = \exp\left(\frac{\hat{H}_0}{\mathrm{i}\hbar}t\right)|\psi(t)\rangle_I$$
$$\hat{O}_I(t) = \exp\left(-\frac{\hat{H}_0}{\mathrm{i}\hbar}t\right)\hat{O}(t)\exp\left(\frac{\hat{H}_0}{\mathrm{i}\hbar}t\right)$$

ここで、下付き添え字 $_I$ があるものが相互作用描像である。

(1) $c_k(t)$ が $\hat{V}(t)$ の 1 次までで次のようになることを示せ。

$$c_n(t) = 1 + \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\int_{-\infty}^{t} \mathrm{d}t'\, V_{nn}(t')$$
$$c_k(t) = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\int_{-\infty}^{t} \mathrm{d}t'\, V_{kn}(t') \qquad (k \neq n)$$

ここで、$V_{kl}(t) := \langle\phi_k|\hat{V}_I(t)|\phi_l\rangle$ である。

[3] 赤字は 7/23 に修正した箇所である。

(2) $k \neq n$ のとき、$t \to \infty$ において $\hat{V}(t)$ の 1 次までで次の等式が成立することを示せ。

$$\begin{aligned} c_k(t) =& \exp\left[\frac{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}{\mathrm{i}\hbar} t\right] \frac{\langle \phi_k | \hat{V}_0 | \phi_n \rangle}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} \\ &- \frac{1}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}t' \exp\left[\frac{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}{\mathrm{i}\hbar} t'\right] \langle \phi_k | \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t'} \hat{V}(t') | \phi_n \rangle \end{aligned}$$

(3) $\hat{V}(t)$ が十分にゆっくりと変化するとき、(2) で示した等式の右辺第 2 項は無視できる。このとき $t \to \infty$ において $\hat{V}(t)$ の 1 次までで次の等式が成立することを示せ。

$$|\psi_n(t)\rangle_I = \exp\left[\frac{1}{\mathrm{i}\hbar} \int_{-\infty}^{t} \mathrm{d}t' \, V_{nn}(t')\right] \left(|\phi_n\rangle + \sum_{k \neq n} \exp\left[\frac{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}{\mathrm{i}\hbar} t\right] \frac{|\phi_k\rangle \langle \phi_k | \hat{V}_0 | \phi_n \rangle}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} \right)$$

(4) Schrödinger 描像における状態 $|\xi_n(t)\rangle$ を次のように定義する。

$$|\xi_n(t)\rangle := \exp\left(\frac{E_n}{\mathrm{i}\hbar} t\right) |\xi_n\rangle$$

このとき、時間に依存しない摂動論を用いて $|\xi_n\rangle$ を $|\phi_k\rangle \quad (k = 1, 2 \cdots)$ の線型結合によって表し（規格化条件は $\langle \phi_n | \xi_n \rangle = 1$ とせよ）、相互作用描像における $|\xi_n(t)\rangle_I$ を $\hat{V}_0$ の 1 次まで求めよ。

(5) $t \to \infty$ において、$\hat{V}(t)$ の 1 次までで次の形の等式が成立することを示し、$\theta(t)$ の表式を $\hat{V}(t)$ の 1 次まで求めよ。

$$|\psi_n(t)\rangle_I = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta(t)} |\xi_n(t)\rangle_I$$

(6) $t \to \infty$ において、(5) で求めた $\theta(t)$ は $\hat{V}(t)$ の 1 次までで時間 t に依存しない定数となることを示せ。

上で示したように、非摂動ハミルトニアンに縮退が無く、摂動項が時間に対して十分にゆっくりと変化するとき、摂動前における n 番目のエネルギー固有状態は摂動の過程で準位間遷移を起こさず摂動後における n 番目のエネルギー固有状態へと時間発展する。このことを断熱定理という。

3 撃力を受ける調和振動子

ハミルトニアンが次のような形で与えられる状況を考える。

$$\hat{H}(t) = \hat{H}_0 + f(t)\hat{V}$$

$\hat{H}_0$ を非摂動ハミルトニアン、$f(t)\hat{V}$ を摂動項とみなして時間に依存する摂動論を適用する。ここで、摂動が $t = 0$ 近傍の短時間のみ働く状況を考える。すなわち、十分に小さい正の実数 ϵ に対して、$|t| > \epsilon$ ならば $f(t) = 0$ であるとする。時刻 t における系の状態を $|\psi(t)\rangle$ とする。

(1) ϵ が十分に小さい時、次の等式を示せ。

$$|\psi(\epsilon)\rangle = \exp\left[-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\left(\int_{-\infty}^{\infty} f(t')\,\mathrm{d}t'\right)\hat{V}\right]|\psi(-\epsilon)\rangle$$

具体的な状況として、1 次元調和振動子に力積が F_0 である撃力が働く状況を考える。

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}\hat{x}^2, \quad f(t) = \delta(t), \quad \hat{V} = -F_0\hat{x}$$

調和振動子においては、消滅演算子を

$$\hat{a} = \frac{\hat{p}}{\sqrt{2m\hbar\omega}} - \mathrm{i}\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x}$$

と定義すると、基底状態 $|0\rangle$ は $\hat{a}\,|0\rangle = 0$ によって定義され、第 n 励起状態 $|n\rangle$ は $|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}\left(\hat{a}^\dagger\right)^n|0\rangle$ と書くことができる。

(2) $t < 0$ において系が基底状態にあったとき、$t > 0$ においても基底状態にとどまっている確率を求めよ。
(ヒント：演算子 $\hat{A}, \hat{B}$ に対して、$\left[\hat{A}, \hat{B}\right]$ が c 数[4]であるときに成立する、次の恒等式を用いよ。)

$$\mathrm{e}^{\hat{A}+\hat{B}} = \mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\left[\hat{A},\hat{B}\right]}\mathrm{e}^{\hat{A}}\mathrm{e}^{\hat{B}}$$

[4]演算子として表された量子力学的 (quantum) な量を q 数と呼ぶのに対して、確定値を取る複素数を古典的 (classical) な量という意味で c 数と呼ぶ。