量子力学 II 演習 問題 (第 12回)

樋口 さぶろお*

1997年1月16日

Hamiltonian が時間に依存する場合の量子力学の近似法を学ぶ.

[12-1] 非定常状態の摂動論 (復習)

これは, Hamiltoinian の時間変化が小さい場合に用いる近似である.

系の Hamiltonian は時間に依存しない部分 H_0 と依存する部分 $V(t)$ により,

(1) $H(t) = H_0 + \lambda V(t)$

と書かれる. 小さい無次元 parameter λ は摂動の次数を数えるために導入した. 無摂動 Hamiltonian の規格直交化された固有関数を $\{u_n\}$: $H_0 u_n(x) = E_n u_n(x)$ とする. Schrödinger 方程式 $i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = H\psi$ の解を, 係数 $a_n(t)$ を用いて

(2) $$\psi(x,t) = \sum_n a_n(t) u_n(x) \exp[-iE_n t/\hbar]$$

と書く.

1. 係数 $a_n(t)$ の時間発展を決める (厳密な) 微分方程式を導け.
2. 時刻 $t=0$ では $a_n(t) = \delta_{mn}$ だったとする. 摂動 $\lambda V(t)$ が小さいとして, 摂動展開 $a_n(t) = \delta_{mn} + \lambda a_n^{(1)}(t) + O(\lambda^2)$ により,

   (3) $$\frac{d\lambda a_n^{(1)}(t)}{dt} = \frac{1}{i\hbar}\langle u_n|\lambda V(t)|u_m\rangle \exp[i(E_n - E_m)t/\hbar]$$

   を示せ.

*hig@rice.c.u-tokyo.ac.jp, URL: http://rice.c.u-tokyo.ac.jp/~hig/, へや: 駒場 4 号館 413B(学生室の隣) 氷上研究室, でんわ: (03)54.54.67.35

3. 摂動が, 時間によらない V_0 により

 (4) $\lambda V(t) = \lambda V_0 \cdot 2\sin\omega t \quad (\omega > 0)$

 と書ける場合, 式 (3) を積分して

 (5) $\lambda a_n^{(1)}(t) = -\frac{\langle u_n|\lambda V_0|u_m\rangle}{i\hbar}\left(\frac{\mathrm{e}^{i(\omega_{nm}+\omega)t}-1}{\omega_{nm}+\omega} - \frac{\mathrm{e}^{i(\omega_{nm}-\omega)t}-1}{\omega_{nm}-\omega}\right)$

 ただし $\omega_{nm} := (E_n - E_m)/\hbar$ を導け.

[12-2] Adiabatic 近似

Hamiltoinian の時間変化が遅い場合に用いる近似である.

時間による Hamiltonian $H(t)$ に対し, 各時刻での規格直交化された固有関数を考えることができる:

(6) $H(t)u_n(x,t) = E_n(t)u_n(x,t)$

時間変化が '無限に' ゆっくりである時, 時刻 $t = t_0$ に $u_n(x,t_0)$ にあった状態は, 時刻 $t = t_1$ で状態 $u_n(x,t_1)$ ($u_n(x,t_0)$ から連続的に変化したもの) に留まると考えられる. 変化が有限の速度で起こるときには, この極端な場合からの展開として考える.

1. Schrödinger 方程式の解を, 係数 $a_n(t)$ を用いて

 (7) $\psi(x,t) = \sum_n a_n(t)u_n(x,t)\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\int_0^t E_n(t')dt'\right]$

 と書く. 係数 $a_n(t)$ の時間発展を決める微分方程式を求めよ.

2. 上の結果に現れたであろう $\langle u_k|\frac{\partial u_n}{\partial t}\rangle$ が

 (8) $\left\langle u_k\middle|\frac{\partial u_n}{\partial t}\right\rangle = -(E_k - E_n)^{-1}\left\langle u_k\middle|\frac{\partial H}{\partial t}\middle|u_n\right\rangle \quad (k \neq n)$

 と書けることを示せ.

Hint. 実は, 位相を適当に選んで $\left\langle u_n\middle|\frac{\partial u_n}{\partial t}\right\rangle = 0$ とできる. 以下, これを用いてよい.

3. 時刻 $t = 0$ では, 系は状態 u_m にあったとする. 量 $a_n, \omega_{nm}, u_n, \partial H/\partial t$ の変化が十分遅いとし,

$$(9) \quad a_n(t) \approx \frac{1}{i\hbar\omega_{nm}^2} \left\langle u_n \left| \frac{\partial H}{\partial t} \right| u_m \right\rangle (\exp[i\omega_{nm}t] - 1)$$

を導け.

[12-3] Sudden 近似

Hamiltoinian の時間変化が速い場合に用いる近似である.

Hamiltonian が, 時刻 $t = 0, t_0$ で以下のように不連続的に変化するとする ($H^{(i)}$ それぞれは時間に依存しない):

$$(10) \quad H(t) = \begin{cases} H^{(0)} & (t < 0) \\ H^{(1)} & (0 < t < t_0) \\ H^{(2)} & (t > t_0) \end{cases} .$$

規格直交化された固有関数をそれぞれ $H^{(i)}u_n^{(i)}(x) = E_n^{(i)}u_n^{(i)}(x) (i = 0, 1, 2)$ とする. Schrödinger 方程式の解 $\psi(x, t)$ は, 時間によりそれぞれ

$$(11) \quad \psi(x, t) = \sum_n a^{(i)} u_n^{(i)}(x) \exp[-iE_n^{(i)}t/\hbar] \quad (i = 0, 1, 2)$$

と展開されるとする.

1. 係数 $a_n^{(1)}$ を $a_n^{(0)}$ で表せ.

Hint. Schrödinger 方程式は時間に関して 1 階の微分方程式なので, 波動関数の 0 階微分は連続, 1 階微分は不連続.

2. 式

$$(12) \quad a_n^{(2)} = \sum_m a_m^{(0)} \sum_k \langle u_n^{(2)} | u_k^{(1)} \rangle \exp[-i(E_k^{(1)} - E_n^{(2)})t_0/\hbar] \langle u_k^{(1)} | u_m^{(0)} \rangle$$

を示せ.

3. 時刻 $t = 0$ に系は状態 $u_m^{(0)}$ にあったとする. 時間 t_0 が短いとき,

$$(13) \quad a_n^{(2)} = \sum_m a_m^{(0)} \langle u_n^{(2)} | (1 - (it_0/\hbar)(H^{(1)} - H^{(2)})) | u_m^{(0)} \rangle$$

を示せ.

[12-4]　時間に依存する摂動論の応用

1次元の調和振動子を考える. 系は $t < 0$ では基底状態にあった. $t > 0$ で時間に依存する摂動

(14) $V(x,t) = Ax^2 \exp[-t/\tau]$

が加わったとする.

十分時間が経過したとき ($t \gg \tau$), 系が各励起状態にある確率を, 時間に依存する摂動論の1次で求めよ.

参考文献

[1] 中嶋, 吉岡, 例解 量子力学演習, 物理入門コース / 演習 3 (1991) 岩波書店.

[2] 中嶋, 量子力学 II, 物理入門コース 6 岩波書店.

[3] 小出, 量子力学 (II) (改訂版), 基礎物理学選書 5B(1990), 裳華房.

[4] L. I. Schiff, *Quantum Mechanics*, 3rd edition, McGraw-Hill (1968). 訳書は吉岡書店.

[5] J. J. Sakurai, *Modern Quantum Mechanics*, Benjamin (1985). 訳書は吉岡書店.