

応用量子物性講義ノート

Yuto Masuda and Haruki Aoki

更新日 November 12, 2024

Abstract

「応用量子物性」の自主的な講義ノートである. Griffith と書いてある例題は David J. Griffith, *Introduction to Quantum Mechanics 3rd Edition* からの引用である.

Contents

Contents

Chapter 1

近似法

1.1 変分法

$$\hat{H} |k\rangle = E_k |k\rangle \quad (1.1.1)$$

変分法 (variational principle) とは Hamiltonian の基底エネルギー E_0 の近似法である¹。変分法は式 (1.1.1) において \hat{H} の一般の固有値を求めることが困難であるとき、基底エネルギーのみを求めるときに用いられる。量子系において、基底エネルギーは系の特徴の 1 つであるため、それが分かることだけでも、十分な議論となる場合があるのだ。

1.1.1 基本原理

変分法は、

1. 試行関数 $|\psi\rangle$ をたくさん用意し、
2. それぞれのエネルギー $E(\psi)$ を計算し、
3. その中で最小の $E(\psi)$ を E_0 の近似解とする

近似法である。ここでは、変分法的基本原理を説明する。

命題 1.1: 変分法的基本原理

任意の状態ベクトル $|\psi\rangle$ に対して $|\psi\rangle$ でのエネルギー関数 $E(\psi)$ について、式 (1.1.2) なる不等式が成り立つ。

$$E(\psi) = \frac{\langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle} \geq E_0 \quad (1.1.2)$$

ただし E_0 は \hat{H} の固有エネルギーの中で最低のものである。

Proof. 任意の状態ベクトル $|\psi\rangle$ を Hilbert 空間の基底 $|k\rangle$ を用いて、

$$|\psi\rangle = \sum_k c_k |k\rangle \quad (1.1.3)$$

と展開する。左から $\langle k'|$ を作用させると

$$\langle k'|\psi\rangle = \sum_k c_k \langle k'|k\rangle = \sum_k c_k \delta_{k',k} = c_{k'} \quad (1.1.4)$$

¹ 近似法には摂動法と変分法がある。摂動法は Hamiltonian が厳密に解ける項 \hat{H}^0 と摂動項 $\hat{\delta}$ を用いて、 $\hat{H} = \hat{H}^0 + \hat{\delta}$ と表され、摂動項が小さいときのみ有効である。これに対し、変分法はどんなときでも有効である。

を得る。式 (1.1.4) は任意の k に対して成り立つので式 (1.1.3) は以下のように変形できる。

$$|\psi\rangle = \sum_k \langle k|\psi\rangle |k\rangle \quad (1.1.5)$$

$$= \sum_k |k\rangle \langle k|\psi\rangle \quad (1.1.6)$$

式 (1.1.6) を用いて式 (1.1.2) の分子を以下のように変形する。

$$\langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{H} \sum_k |k\rangle \langle k|\psi\rangle \quad (1.1.7)$$

$$= \sum_k \langle\psi|\hat{H}|k\rangle \langle k|\psi\rangle \quad (1.1.8)$$

$$= \sum_k E_k \langle\psi|k\rangle \langle k|\psi\rangle \quad (1.1.9)$$

$$= \sum_k E_k |\langle k|\psi\rangle|^2 \quad (1.1.10)$$

また,

$$\langle\psi|\psi\rangle = \sum_k |\langle k|\psi\rangle|^2 \quad (1.1.11)$$

であるから,

$$E(\psi) = \frac{\langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle} \quad (1.1.12)$$

$$= \frac{\sum_k E_k |\langle k|\psi\rangle|^2}{\sum_k |\langle k|\psi\rangle|^2} \quad (1.1.13)$$

$$\geq \frac{\sum_k E_0 |\langle k|\psi\rangle|^2}{\sum_k |\langle k|\psi\rangle|^2} = E_0 \quad (1.1.14)$$

を得る。 □

命題 1.1 より。あらゆる状態ベクトル $|\psi\rangle$ のエネルギーは基底エネルギー E_0 以上である。

例題 1.1

ポテンシャル $V(x) = \lambda x^4$ 中に粒子がある系を考える。この系の Hamiltonian は

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \lambda x^4 \quad (1.1.15)$$

である。予想される基底状態が満たすべき条件は

- $x = 0$ で存在確率が最大
- $|x| \rightarrow \infty$ で存在確率が 0
- 節がない^a

である。この条件と変分法を用いて、エネルギーの近似値を求めよ。

^a節があると微係数が大きい点が存在し、これは運動エネルギーを大きくしてしまう。

試行関数として $\psi(x, \alpha) = e^{-\alpha x^2/2}$, $\alpha > 0$ として, エネルギー関数を計算する. 見通しをよくするために,

$$I_0 := \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha x^2} dx \quad (1.1.16)$$

$$I_1 := \int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-\alpha x^2} dx \quad (1.1.17)$$

$$I_2 := \int_{-\infty}^{\infty} x^4 e^{-\alpha x^2} dx \quad (1.1.18)$$

とすると,

$$E(\alpha) = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \hat{H} \psi dx}{\int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \psi dx} \quad (1.1.19)$$

$$= \frac{-\frac{\hbar^2 \alpha^2}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-\alpha x^2} dx + \lambda \int_{-\infty}^{\infty} x^4 e^{-\alpha x^2} dx}{\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha x^2} dx} \quad (1.1.20)$$

$$= \frac{-\frac{\hbar^2 \alpha^2}{2m} I_1 + \lambda I_2}{I_0} \quad (1.1.21)$$

である. I_1 は,

$$I_1 = \int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-\alpha x^2} dx = \int_{-\infty}^{\infty} x \frac{d}{dx} \left(-\frac{e^{-\alpha x^2}}{2\alpha} \right) dx \quad (1.1.22)$$

$$= -\frac{1}{2\alpha} \left(\left[x e^{-\alpha x^2} \right]_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha x^2} dx \right) \quad (1.1.23)$$

$$= \frac{1}{2\alpha} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha x^2} dx \quad (1.1.24)$$

$$= \frac{1}{2\alpha} I_0 \quad (1.1.25)$$

と計算できる. I_2 は,

$$I_2 = \int_{-\infty}^{\infty} x^4 e^{-\alpha x^2} dx = \int_{-\infty}^{\infty} x^3 \frac{d}{dx} \left(-\frac{e^{-\alpha x^2}}{2\alpha} \right) dx \quad (1.1.26)$$

$$= -\frac{1}{2\alpha} \left(\left[x^3 e^{-\alpha x^2} \right]_{-\infty}^{\infty} - 3 \int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-\alpha x^2} dx \right) \quad (1.1.27)$$

$$= \frac{3}{2\alpha} I_1 \quad (1.1.28)$$

$$= \frac{3}{4\alpha^2} I_0 \quad (1.1.29)$$

であるから, 式 (1.1.21) は,

$$E(\alpha) = \frac{-\frac{\hbar^2 \alpha^2}{2m} \frac{1}{2\alpha} I_0 + \lambda \frac{3}{4\alpha} I_0}{I_0} \quad (1.1.30)$$

$$= -\frac{\hbar^2 \alpha}{4m} + \frac{3\lambda}{4\alpha^2} \quad (1.1.31)$$

となる。第1項は運動エネルギーを、第2項はポテンシャルエネルギーを、それぞれ表している^a。式(1.1.21)の最小値が基底エネルギー E_0 の近似解である。よって、 $\frac{d}{d\alpha}E(\alpha_0) = 0$ となる α_0 を式(1.1.21)に代入することで近似解、

$$E(\alpha_0) = \frac{3}{8} \left(\frac{6\hbar^4 \lambda}{m^2} \right)^{1/3} \quad (1.1.32)$$

を得る。

^aポテンシャルエネルギーの項は α が大きくなるほど小さくなる。これは、波動関数が狭まり $x=0$ での存在確率が大きくなるためである。一方、運動エネルギーの項は α が大きくなるほど大きくなる。これは、不確定性関係 $\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$ より、運動量のばらつきが大きくなるためである。

1.1.2 (変分法の例題) ヘリウム原子

本節では、変分法の威力を確認するために、ヘリウム原子の基底エネルギーを考える。ヘリウム原子において、 $\frac{m}{M} \rightarrow 0$ であり、原子核が動かない(原子核の運動エネルギーが無視できる)とする。これを Born-Oppenheimer 近似という。ヘリウム原子は電荷 $2e$ の原子核と電荷 $-e$ の電子を2つもつので、Hamiltonian は、

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_2^2 - \frac{2e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1} - \frac{2e^2}{4\pi\epsilon_0 r_2} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}} \quad (1.1.33)$$

である。第1項から第4項は水素陽原子の Hamiltonian \hat{H}^0 であり厳密に解くことが出来ることを利用して、第5項を無視して考えたとき、試行関数を定めて変分法を用いたときを比較する。なお、実験によりヘリウム原子の基底エネルギーは -78.6 eV と求まっている。

例題 1.2: ヘリウム原子の基底エネルギー (荒い近似)

計算を行うと、ヘリウムの原子番号を Z として \hat{H}^0 の基底波動関数、

$$\psi = \frac{Z^3}{\pi a_0^3} \exp\left(-Z \frac{r_1 + r_2}{a_0}\right) \quad (1.1.34)$$

と \hat{H}^0 の基底エネルギー、

$$E = -8 \text{ Ry} \approx -108.8 \text{ eV} \quad (1.1.35)$$

が求まる^{abc}。

$$^a a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{me^2} \approx 5.29 \times 10^{-11} \text{ m: Bohr 半径}$$

$$^b Z = 2$$

$$^c \text{Ry} = \frac{\hbar^2}{2m\omega^2} \approx 13.6 \text{ eV: Rydberg 定数}$$

例題 1.3: ヘリウム原子の基底エネルギー (変分法)

例題 1.2 の結果とヘリウム原子の基底エネルギーの測定結果は -78.6 eV と大きく異なっているため、相互作用の項を取り入れた近似を考える。式(1.1.34)を試行関数 $\psi(Z)$ とする。 $\psi(Z)$ を用いてエネルギーを計算する。

$$E(Z) = \frac{\int \psi^* \hat{H} \psi d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2}{\int \psi^* \psi d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2} \quad (1.1.36)$$

$$= -2 \left(4Z - Z^2 - \frac{5}{8}Z \right) \text{ Ry} \quad (1.1.37)$$

となる。式 (1.1.37) が最小となるような Z を Z_0 とすると $Z_0 = 27/16$ であったので、

$$E(Z) \geq E(Z_0) = -77.5 \text{ eV} \quad (1.1.38)$$

となった。式 (1.1.38) と式 (1.1.35) を比べると、荒い近似の方が真の基底エネルギー -78.6 eV に近い値が得られた^{ab}。

^a $Z_0 < 2$ は遮蔽効果により有効電荷が $2e$ より小さくなったことを意味する。

^b積分の計算は David J. Griffith, *Introduction to Quantum Mechanics*, pp. 333-334 にある。

1.1.3 変分法の誤差の評価

真の基底状態 $|E_0\rangle$ に第 1 励起状態 $|E_1\rangle$ を 10% 含んだ試行関数 $|\psi\rangle = |E_0\rangle + \frac{1}{10}|E_1\rangle$ を使ってエネルギーを計算する。

$$E(\psi) = \frac{\langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle} \quad (1.1.39)$$

$$= \frac{\langle E_0|\hat{H}|E_0\rangle + \frac{1}{100}\langle E_1|\hat{H}|E_1\rangle}{1 + \frac{1}{100}} \quad (1.1.40)$$

$$= \frac{E_0 + 0.01E_1}{1.01} \quad (1.1.41)$$

$$\approx 0.99E_0 + 0.01E_1 \quad (1.1.42)$$

試行関数で 10% 含まれていた誤差がエネルギーでは 1% に収まっている。

例題 1.4

無限井戸型ポテンシャル $[-a, a]$ を考える。この問題を厳密に解けば n 番目のエネルギー準位は、

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{n\pi}{2a} \right)^2 \quad (1.1.43)$$

と計算できるが、ここでは変分法を用いて近似解を求める。予想される試行関数の条件は

- $\psi(a) = \psi(-a) = 0$
- 節がない

である。よって今回は

$$\psi(x) = a^2 - x^2 \quad (1.1.44)$$

を採用する。この試行関数を用いたときの基底エネルギーを見積もれ。

$$E(\psi) = \frac{\int_{-a}^a (a^2 - x^2) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \right) (a^2 - x^2) dx}{\int_{-a}^a (a^2 - x^2)^2 dx} \quad (1.1.45)$$

$$= \frac{10}{\pi^2} E_1 \quad (1.1.46)$$

$$\approx 1.01 E_1 \quad (1.1.47)$$

真の基底エネルギー E_1 に近い値が得られた^a。

^aこのくらいの計算が期末試験に出たことがある。

1.1.4 練習問題

練習問題 1.1: Griffith Example 8.1

1次元調和振動子 $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$ の基底エネルギーを見積もれ。ただし、試行関数を $\psi(x) = \left(\frac{2b}{\pi}\right)^{1/4} e^{-bx^2}$ とせよ。試行関数は規格化されている。

$$E(b) = \langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle = \left(\frac{2b}{\pi}\right)^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-bx^2} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2\right) e^{-bx^2} dx \quad (1.1.48)$$

$$= \frac{\hbar^2 b}{2m} + \frac{m\omega^2}{8b} \quad (1.1.49)$$

次に $E(b)$ の最小値を求める。

$$\frac{d}{db} E(b_0) = \frac{\hbar^2}{2m} - \frac{m\omega^2}{8b_0^2} = 0 \Rightarrow b_0 = \frac{m\omega}{2\hbar} \quad (1.1.50)$$

$$E(b_0) = \frac{1}{2}\hbar\omega \quad (1.1.51)$$

偶然にも試行関数は基底エネルギーの固有関数となっていたため、 $E(b_0)$ は基底エネルギーと一致した。

練習問題 1.2: Griffith Example 8.2

デルタ関数型ポテンシャル $\hat{H} = \frac{d^2}{dx^2} - \alpha\delta(x)$ の基底エネルギーを見積もれ。ただし、試行関数を $\psi(x) = \left(\frac{2b}{\pi}\right)^{1/4} e^{-bx^2}$ とせよ。試行関数は規格化されている。

$$\langle V \rangle = -\alpha \left(\frac{2b}{\pi}\right)^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-2bx^2} \delta(x) dx = -\alpha \left(\frac{2b}{\pi}\right)^{1/2} \quad (1.1.52)$$

$$\langle T \rangle = \frac{\hbar^2 b}{2m} \quad (1.1.53)$$

$$E(b) = \frac{\hbar^2 b}{2m} - \alpha \left(\frac{2b}{\pi}\right)^{1/2} \quad (1.1.54)$$

$E(b)$ の最小値を求める。

$$\frac{d}{db} E(b_0) = \frac{\hbar^2}{2m} - \frac{\alpha}{\sqrt{2\pi b_0}} = 0 \Rightarrow b_0 = \frac{2m^2 \alpha^2}{\pi \hbar^4} \quad (1.1.55)$$

よって、基底エネルギーの近似解として

$$E(b_0) = -\frac{m\alpha^2}{\pi \hbar^2} \quad (1.1.56)$$

を得る^a。

^a厳密解を求めることができ、 $\psi(x) = \frac{\sqrt{m\alpha}}{\hbar} e^{-m\alpha|x|/\hbar^2}$, $E_0 = -\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2}$ である。

練習問題 1.3: Griffith Example 8.3

$[0, a]$ の無限井戸型ポテンシャルの基底エネルギーを見積もれ。ただし、試行関数を

$$\psi(x) = \begin{cases} Ax & \text{if } 0 \leq x \leq a/2 \\ A(a-x) & \text{if } a/2 \leq x \leq a \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \quad (1.1.57)$$

とせよ。

規格化条件より、 $A = \frac{2}{a}\sqrt{\frac{3}{a}}$ を得る。波動関数の導関数は

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = \begin{cases} Ax & \text{if } 0 \leq x \leq a/2 \\ A(a-x) & \text{if } a/2 \leq x \leq a \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \quad (1.1.58)$$

である。よって、2 次の微係数として

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = A\delta(x) - 2A\delta\left(x - \frac{a}{2}\right) + A\delta(x-a) \quad (1.1.59)$$

を得る。したがって近似解は

$$E = \int_0^a \psi(x) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \right) \psi(x) dx \quad (1.1.60)$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m} \int_0^a A \left[\delta(x) - \delta\left(x - \frac{a}{2}\right) + \delta(x-a) \right] \psi(x) dx \quad (1.1.61)$$

$$= \frac{12\hbar^2}{2ma^2} \quad (1.1.62)$$

である^a。

^a厳密解は $E_0 = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$

練習問題 1.4: Griffith Problem 8.4 (a)

試行関数 $|\psi\rangle$ が基底状態と直交するとき、つまり $\langle\psi|0\rangle$ のとき、

$$E(\psi) \geq E_1 \quad (1.1.63)$$

であることを示せ^a。ただし E_1 は第 1 励起状態のエネルギーである。 $|\psi\rangle$ は規格化されている。

^a例えば偶関数のポテンシャルに対し奇関数の試行関数で計算すれば第 1 励起状態のエネルギーの近似解が得られる。

Proof.

$$E(\psi) = \sum_{k=0} E_k |\langle\psi|k\rangle|^2 \quad (1.1.64)$$

$$= E_0 |\langle \psi | 0 \rangle|^2 + \sum_{k=1} |\langle \psi | k \rangle|^2 \quad (1.1.65)$$

$$= 0 + \sum_{k=1} |\langle \psi | k \rangle|^2 \quad (1.1.66)$$

$$\geq E_1 \sum_{k=1} |\langle \psi | k \rangle|^2 = E_1 \quad (1.1.67)$$

□

1.2 摂動 I(定常摂動)

Hamiltonian が時間に依存しない定常摂動 (time-independent perturbation) を扱う。

1.2.1 準備

摂動が無い状態の Schödinger 方程式,

$$\hat{H}^{(0)} |n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)} |n^{(0)}\rangle \quad (1.2.1)$$

が厳密に解くことができるとする。ここに摂動 \hat{V} を加わったこと²を考えると、摂動 Hamiltonian を \hat{V} として、

$$(\hat{H}^{(0)} + \hat{V}) |n\rangle = E_n |n\rangle \quad (1.2.2)$$

とかける。摂動の大きさを表すパラメータを λ として式 (1.2.2) を

$$\hat{H} = \hat{H}^{(0)} + \lambda \hat{V} \quad (1.2.3)$$

とする。 $\lambda \rightarrow 0$ ならば明らかに、

$$\begin{cases} |n\rangle \rightarrow |n^{(0)}\rangle \\ E_n \rightarrow E_n^{(0)} \end{cases} \quad (1.2.4)$$

である。ここで、式 (1.2.3) の解が、

$$\begin{cases} |n\rangle = |n^{(0)}\rangle + \lambda |n^{(1)}\rangle + \lambda^2 |n^{(2)}\rangle + \dots \\ E_n = E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \dots \end{cases} \quad (1.2.5)$$

と書けたとする。 $|n^{(1)}\rangle$, $|n^{(2)}\rangle$, $E_n^{(1)}$, $E_n^{(2)}$ を考える。規格化条件として

$$\langle n^{(0)} | n \rangle = 1 \quad (1.2.6)$$

を定める。式 (1.2.5) を式 (1.2.3) に代入して、 λ の次数ごとにまとめると、

$$(E_n^{(0)} - \hat{H}^{(0)}) |n^{(0)}\rangle = 0 \quad (1.2.7)$$

$$(E_n^{(0)} - \hat{H}^{(0)}) |n^{(1)}\rangle + E_n^{(1)} |n^{(0)}\rangle = \hat{V} |n^{(0)}\rangle \quad (1.2.8)$$

$$(E_n^{(0)} - \hat{H}^{(0)}) |n^{(2)}\rangle + E_n^{(1)} |n^{(1)}\rangle + E_n^{(2)} |n^{(0)}\rangle = \hat{V} |n^{(1)}\rangle \quad (1.2.9)$$

$$(1.2.10)$$

を得る。

²摂動の例: 光, 電場

1.2.2 1次摂動

まずエネルギー補正 $E_n^{(1)}$ について考える．式 (1.2.8) の両辺に $\langle n^{(1)} |$ を作用すると,

$$\langle n^{(1)} | (E_n^{(0)} - \hat{H}^{(0)}) | n^{(1)} \rangle + \langle n^{(1)} | E_n^{(1)} | n^{(0)} \rangle = \langle n^{(1)} | \hat{V} | n^{(0)} \rangle \quad (1.2.11)$$

$$\Leftrightarrow E_n^{(0)} \langle n^{(1)} | n^{(1)} \rangle - \langle n^{(1)} | \hat{H}^{(0)} | n^{(1)} \rangle + E_n^{(1)} \langle n^{(1)} | n^{(0)} \rangle = \langle n^{(1)} | \hat{V} | n^{(0)} \rangle \quad (1.2.12)$$

$$\Leftrightarrow 0 + E_n^{(1)} \langle n^{(0)} | n^{(0)} \rangle = \langle n^{(0)} | \hat{V} | n^{(0)} \rangle \quad (1.2.13)$$

$$\Leftrightarrow E_n^{(1)} = \langle n^{(0)} | \hat{V} | n^{(0)} \rangle \quad (1.2.14)$$

を得る．よって，1次摂動によるエネルギー補正は

1次摂動によるエネルギー補正

$$E_n^{(1)} = \langle n^{(0)} | \hat{V} | n^{(0)} \rangle \quad (1.2.15)$$

である．

次に固有ベクトル $|n^{(1)}\rangle$ の補正を求める．式 (1.2.8) の両辺に $\langle m^{(0)} |$ ，ただし $m \neq n$ を作用すると，

$$\langle m^{(0)} | (E_n^{(0)} - \hat{H}^{(0)}) | n^{(1)} \rangle + \langle m^{(0)} | E_n^{(1)} | n^{(0)} \rangle = \langle m^{(0)} | \hat{V} | n^{(0)} \rangle \quad (1.2.16)$$

$$E_n^{(0)} \langle m^{(0)} | n^{(1)} \rangle - E_m^{(0)} \langle m^{(0)} | n^{(1)} \rangle + 0 = \langle m^{(0)} | \hat{V} | n^{(0)} \rangle \quad (1.2.17)$$

$$\langle m^{(0)} | n^{(1)} \rangle = \langle m^{(0)} | \hat{V} | n^{(0)} \rangle (E_n^{(0)} - E_m^{(0)}) \quad (1.2.18)$$

$$(1.2.19)$$

ただし，エネルギー縮退は無く，

$$E_n^{(0)} - E_m^{(0)} \neq 0 \quad (1.2.20)$$

とする．ところで，Hermite 演算子である $\hat{H}^{(0)}$ の固有ベクトルに関する完全性より，

$$I = \sum_m |m^{(0)}\rangle \langle m^{(0)}| \quad (1.2.21)$$

であるから，式 (1.2.21) の両辺に右から $|n^{(1)}\rangle$ をかけて，

$$|n^{(1)}\rangle = \sum_m |m^{(0)}\rangle \langle m^{(0)} | n^{(1)} \rangle \quad (1.2.22)$$

を得る．式 (1.2.22) を式 (1.2.18) に代入すると，

1次摂動による固有ベクトル補正

$$|n^{(1)}\rangle = \sum_{m \neq n} \frac{\langle m^{(0)} | \hat{V} | n^{(0)} \rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} |m^{(0)}\rangle \quad (1.2.23)$$

を得る．

1.2.3 (1次摂動の例題) ヘリウム原子

再びヘリウム原子のエネルギーを考えてみよう．今度は，変分法ではなく，1次の摂動を用いる．

例題 1.5: ヘリウム原子の基底エネルギー (1 次摂動)

水素陽原子の Hamiltonian を \hat{H}_0 とし、電子-電子相互作用を水素陽原子に対する摂動 \hat{V} と解釈してヘリウム原子の基底エネルギーを計算せよ。ただし、

$$\hat{H} := \hat{H}^{(0)} + \hat{V} \quad (1.2.24)$$

$$\hat{H}^{(0)} := -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m}\nabla_2^2 - \frac{2e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1} - \frac{2e^2}{4\pi\epsilon_0 r_2} \quad (1.2.25)$$

$$\hat{V} := \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}} \quad (1.2.26)$$

$$(1.2.27)$$

である。

$\hat{H}^{(0)}$ の基底状態の固有関数は、

$$\psi^{(0)} = \frac{Z^3}{\pi a_0^3} \exp\left[-\frac{Z(r_1 + r_2)}{a_0}\right] \quad (1.2.28)$$

である。よって、 \hat{V} による 1 次のエネルギー補正は以下のように計算できる。

$$E^{(1)} = \langle \psi^{(0)} | \hat{V} | \psi^{(0)} \rangle \quad (1.2.29)$$

$$= \int \psi^{(0)*} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}} \psi^{(0)} d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \quad (1.2.30)$$

$$= \frac{5}{4} Z \text{ Ry} \quad (1.2.31)$$

よって、基底エネルギー

$$E_0 = E^{(0)} + E^{(1)} \quad (1.2.32)$$

$$= -8 \text{ Ry} + \frac{5}{4} \times 2 \text{ Ry} \quad (1.2.33)$$

$$= -74.8 \text{ eV} \quad (1.2.34)$$

を得る^a。

^a測定値は -78.6 eV

1.2.4 2 次摂動

式 (1.2.9) の両辺に $\langle n^{(0)} |$ を作用すると、

$$\langle n^{(0)} | (E_n^{(0)} - \hat{H}^{(0)}) | n^{(2)} \rangle + \langle n^{(0)} | E_n^{(1)} | n^{(1)} \rangle + \langle n^{(0)} | E_n^{(2)} | n^{(0)} \rangle = \langle n^{(0)} | \hat{V} | n^{(1)} \rangle \quad (1.2.35)$$

$$E_n^{(0)} \langle n^{(0)} | n^{(2)} \rangle - E_n^{(0)} \langle n^{(0)} | n^{(2)} \rangle + E_n^{(1)} \langle n^{(0)} | n^{(1)} \rangle + E_n^{(2)} \langle n^{(0)} | n^{(0)} \rangle = \langle n^{(0)} | \hat{V} | n^{(1)} \rangle \quad (1.2.36)$$

$$E_n^{(2)} = \langle n^{(0)} | \hat{V} | n^{(1)} \rangle \quad (1.2.37)$$

となる。式 (1.2.23) を式 (1.2.37) に代入すると、

$$E_n^{(2)} = \langle n^{(0)} | \hat{V} | n^{(1)} \rangle \quad (1.2.38)$$

$$= \sum_{m \neq n} \frac{\langle m^{(0)} | \hat{V} | n^{(0)} \rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \langle n^{(0)} | \hat{V} | m^{(0)} \rangle \quad (1.2.39)$$

$$= \sum_{m \neq n} \frac{|\langle m^{(0)} | \hat{V} | n^{(0)} \rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \quad (1.2.40)$$

と計算できて、2次摂動によるエネルギー補正を得る。

2次摂動によるエネルギー補正

$$E_n^{(2)} = \sum_{m \neq n} \frac{|\langle m^{(0)} | \hat{V} | n^{(0)} \rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \quad (1.2.41)$$

また、基底状態においては $E_0^{(0)} < E_m^{(0)}$ である。常に式 (1.2.41) の和の部分の分母は負であるため、基底状態のエネルギーは2次摂動により必ず下がる。

1.2.5 (2次摂動の例題) 量子閉じ込め Stark 効果

ここでは、2次摂動を用いた例題として Stark 効果³⁴を考えよう。

例題 1.6: 量子閉じ込め Stark 効果

定常状態の Hamiltonian $\hat{H}^{(0)}$ に、電場による摂動 \hat{V} を加えた Hamiltonian \hat{H} を考える。ただし、定常状態のポテンシャルは、長さ L の無限井戸型ポテンシャル \hat{U} である。 \hat{U} , \hat{V} , $\hat{H}^{(0)}$, \hat{H} は、

$$U(x) := \begin{cases} 0 & |x| \leq L/2 \\ \infty & \text{otherwise} \end{cases} \quad (1.2.42)$$

$$V(x) := -e\phi(x) = eEx \quad (e > 0) \quad (1.2.43)$$

$$\hat{H}^{(0)} := -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \hat{U}(x) \quad (1.2.44)$$

$$\hat{H} := \hat{H}^{(0)} + \hat{V}(x) \quad (1.2.45)$$

$$(1.2.46)$$

と定義される。また、 $\hat{H}^{(0)}$ の固有エネルギーとそれに属する固有関数は、

$$E_n^{(0)} = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi}{L}\right)^2 n^2, \quad (n = 1, 2, 3, \dots) \quad (1.2.47)$$

$$\phi_n(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{L}} \cos\left(\frac{n\pi}{L}x\right) & n : \text{odd} \\ \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) & n : \text{even} \end{cases} \quad (1.2.48)$$

のようになっている。このとき、2次の摂動まで用いて \hat{V} の影響によるエネルギー補正を計算せよ。

1次摂動によるエネルギー補正は奇関数の積分になるため0である。^a

2次摂動によるエネルギー補正は、

$$E_1^{(2)} = \sum_{m \neq 1} \frac{|V_{m1}|^2}{E_1^{(0)} - E_m^{(0)}} \quad (1.2.49)$$

$$V_{m1} = eE \int \phi_m^* x \phi_1 dx \quad (1.2.50)$$

³ Johannes Stark (1874-1957)

⁴ 電場によるエネルギー準位の変化を Stark 効果という。

$$\begin{cases} = 0 & n : \text{odd} \\ \neq 0 & n : \text{even} \end{cases} \quad (1.2.51)$$

$$E_1^{(2)} = \frac{|V_{21}|^2}{E_1^{(0)} - E_2^{(0)}} + \frac{|V_{41}|^2}{E_1^{(0)} - E_4^{(0)}} + \dots \quad (1.2.52)$$

$$\approx \frac{|V_{21}|^2}{E_1^{(0)} - E_2^{(0)}} \quad (1.2.53)$$

$$= -\frac{256}{234\pi^4} \frac{(eEL)^2}{E_1^{(0)}} \quad (1.2.54)$$

と計算できて、2 次の摂動を考えるとエネルギーは低下することがわかる。

^aもし 0 でないならば、電場をかける向きによりエネルギーが変わることを意味するが、これは対称性より不合理である。

1.2.6 縮退がある場合の摂動論

1 次摂動のエネルギー補正を求めるときに縮退が無いという条件である式 (1.2.20) を用いて、

$$(E_n^{(0)} - \hat{H}^{(0)}) |n^{(1)}\rangle + E_n^{(1)} |n^{(0)}\rangle = \hat{V} |n^{(0)}\rangle \quad (1.2.55)$$

$$|n^{(1)}\rangle = \sum_{m \neq n} |m^{(0)}\rangle \frac{\langle m^{(0)} | \hat{V} | n^{(0)} \rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \quad (1.2.56)$$

と計算していた。では、エネルギー縮退が存在するとき、どのように計算すればよいだろうか。 $\hat{H}^{(0)}$ の固有値 $E_n^{(0)}$ に、異なる 2 つの固有ベクトル $|n_a^{(0)}\rangle$, $|n_b^{(0)}\rangle$ が属すると状況を考える。すなわち、

$$\hat{H}^{(0)} |n_a^{(0)}\rangle = E_n^{(0)} |n_a^{(0)}\rangle \quad (1.2.57)$$

$$\hat{H}^{(0)} |n_b^{(0)}\rangle = E_n^{(0)} |n_b^{(0)}\rangle \quad (1.2.58)$$

が成立するときである。ただし、Hermite 演算子の固有ベクトルは規格直交化できるので、 $\langle n_i^{(0)} | n_j^{(0)} \rangle = \delta_{ij}$ とする。 $|n_a^{(0)}\rangle$ と $|n_b^{(0)}\rangle$ は同じ固有値をもつため、これらの線形結合 $|n^{(0)}\rangle = \alpha |n_a^{(0)}\rangle + \beta |n_b^{(0)}\rangle$ も、固有値 $E_n^{(0)}$ に属する固有ベクトルである。

まず、式 (??) の両辺に左から $\langle n_a^{(0)} |$ を作用すると、

$$\langle n_a^{(0)} | (E_n^{(0)} - \hat{H}^{(0)}) |n^{(1)}\rangle + \langle n_a^{(0)} | E_n^{(1)} |n^{(0)}\rangle = \langle n_a^{(0)} | \hat{V} |n^{(0)}\rangle \quad (1.2.59)$$

$$\Leftrightarrow E_n^{(0)} \langle n_a^{(0)} | n^{(1)}\rangle - E_n^{(0)} \langle n_a^{(0)} | n^{(1)}\rangle + E_n^{(1)} \langle n_a^{(0)} | n^{(0)}\rangle = \langle n_a^{(0)} | \hat{V} |n^{(0)}\rangle \quad (1.2.60)$$

$$\Leftrightarrow \alpha E_n^{(1)} = \langle n_a^{(0)} | \hat{V} |n^{(0)}\rangle \quad (1.2.61)$$

となる。 $V_{ij} := \langle n_i^{(0)} | \hat{V} |n_j^{(0)}\rangle$ とすれば式 (??) は、

$$\alpha E_n^{(1)} = \alpha V_{aa} + \beta V_{ab} \quad (1.2.62)$$

と書ける。同様に式 (??) の両辺に左から $\langle n_b^{(0)} |$ を作用させたときも考えれば、

$$\begin{cases} \alpha V_{aa} + \beta V_{ab} = \alpha E_n^{(1)} \\ \alpha V_{ba} + \beta V_{bb} = \beta E_n^{(1)} \end{cases} \quad (1.2.63)$$

を得る。これは行列を用いて、

$$\begin{pmatrix} V_{aa} - E_n^{(1)} & V_{ab} \\ V_{ba} & V_{bb} - E_n^{(1)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (1.2.64)$$

のように書き直される。行列の部分が Hermite 行列になっているので、式 (??) は永年方程式である。永年方程式が非自明な解を持つ条件は、

$$\begin{vmatrix} V_{aa} - E_n^{(1)} & V_{ab} \\ V_{ba} & V_{bb} - E_n^{(1)} \end{vmatrix} = 0 \quad (1.2.65)$$

である。よって 1 次の摂動エネルギーとして、

縮退がある場合の摂動論による 1 次エネルギー補正

$$E_n^{(1)} = \frac{1}{2} \left[(V_{aa} + V_{bb} \pm \sqrt{(V_{aa} - V_{bb})^2 + 4|V_{ab}|^2}) \right] \quad (1.2.66)$$

を得る。式 (??) をみると、定常状態では 1 種類であったエネルギーが、縮退が解けて 2 つに分かれている。

例題 1.7

$V_{aa} = V_{bb} = 0$, $V_{ab} = V_{ba} = V$ の場合式 (??) は、

$$() - E_n^{(1)} V \quad (1.2.67)$$

$$V - E_n^{(1)} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (1.2.68)$$

となる。よって 1 次エネルギー補正は、

$$E_n^{(1)} = \begin{cases} +V & \alpha = 1, \beta = 1 \\ -V & \alpha = 1, \beta = -1 \end{cases} \quad (1.2.69)$$

と求まる。これは摂動を加える前に縮退していた 2 つの状態 $|n^{(0)}\rangle = |n_a^{(0)}\rangle \pm |n_b^{(0)}\rangle$ の縮退が解け、エネルギー $E_n^{(0)} + V$ をもつ状態 $|n_a^{(0)}\rangle + |n_b^{(0)}\rangle$ とエネルギー $E_n^{(0)} - V$ をもつ状態 $|n_a^{(0)}\rangle - |n_b^{(0)}\rangle$ に分かれたことを意味している。

1.2.7 (定常摂動の例題) 物質中の電子

例題 1.8: バンドギャップ

長さ L の無限井戸型ポテンシャル中の 1 次元自由電子の波動関数 $\phi_k(x)$ とエネルギー固有値 $\varepsilon_0(k)$ は、

$$\phi_k(x) = \langle x|k \rangle = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ikx} \quad (1.2.70)$$

$$\varepsilon_0(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \left(k = \frac{2\pi}{L} N, N \in \mathbb{N} \right) \quad (1.2.71)$$

である。無限井戸型ポテンシャルに $V(x+a) = V(x)$ を満たすポテンシャル $V(x)$ が加わったときを考える。 $V(x)$ は、

$$V(x) = 2V \cos\left(\frac{2\pi}{a}x\right) \quad (1.2.72)$$

$$= V(e^{i\frac{2\pi}{a}x} + e^{-i\frac{2\pi}{a}x}) \quad (1.2.73)$$

$$= V(e^{igx} + e^{-igx}) \quad (1.2.74)$$

と書けるとする。ただし g は,

$$g := \frac{2\pi}{a} \quad (1.2.75)$$

である。

以下の問いに答えよ。

1. 結晶中の周期ポテンシャルによりバンドギャップができることを 2 次までの摂動論を用いて説明せよ。
2. 縮退のある場合の摂動論を用いてバンドギャップの大きさを見積もれ。
3. バンドギャップと Bragg の回折条件との関係について議論せよ。

1. バンドギャップの成り立ち

2 次の摂動によるエネルギー補正は,

$$E_n = E_n^{(0)} + \langle n^{(0)} | \hat{V} | n^{(0)} \rangle + \sum_{m \neq n} \frac{|\langle m^{(0)} | \hat{V} | n^{(0)} \rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \quad (1.2.76)$$

と書ける。式 (??) に対して離散 Fourier 変換を行うことで、式 (??) の状態とエネルギーのラベリングを n から k に変更する。 $V_{k'k} := \langle k' | \hat{V} | k \rangle$ とすると,

$$E(k) = \varepsilon^{(0)}(k) + V_{kk} + \sum_{k' \neq k} \frac{|V_{k'k}|^2}{\varepsilon^{(0)}(k) - \varepsilon^{(0)}(k')} \quad (1.2.77)$$

と書ける。摂動によるエネルギーは,

$$V_{k'k} = \frac{V}{L} \int_{-L/2}^{L/2} \phi_{k'}^*(x) \hat{V}(x) \phi_k(x) dx \quad (1.2.78)$$

$$= V \left[\frac{\sin\left(\frac{qL}{2}\right)}{\frac{qL}{2}} + \frac{\sin\left(\frac{q'L}{2}\right)}{\frac{q'L}{2}} \right] \quad (1.2.79)$$

と計算される。ただし q と q' を,

$$q := -k' + g + k \quad (1.2.80)$$

$$q' := -k' - g + k \quad (1.2.81)$$

と定義した。摂動によるエネルギーは sinc 関数の形になっているので、 $L \rightarrow \infty$ では規格化されたデルタ関数 $\tilde{\delta}(x_1, x_2)$ と解釈できる。よって,

$$V_{k'k} = V \left(\tilde{\delta}(q, 0) + \tilde{\delta}(q', 0) \right) = \begin{cases} V & k' = k + g \text{ or } k' = k - g \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \quad (1.2.82)$$

である。したがってエネルギーは

$$E(k) = \varepsilon^{(0)}(k) + \frac{V^2}{\varepsilon(k) - \varepsilon(k+g)} + \frac{V^2}{\varepsilon(k) - \varepsilon(k-g)} \quad (1.2.83)$$

となる。式 (??) の振る舞いを第 1 Brillouin ゾーンの内側と外側で確認する。ポテンシャルの対称性から右側のみを計算すればよい。

- (a) 第 1 Brillouin ゾーン内側 $\left(k = k_1 < \frac{\pi}{a}\right)$ の振る舞い

$\varepsilon(k)$ は放物線なので,

$$\begin{cases} \varepsilon(k_1) \ll \varepsilon^{(0)}(k_1 + g) \\ \varepsilon(k_1) < \varepsilon^{(0)}(k_1 - g) \end{cases} \quad (1.2.84)$$

が成り立つ. よって, $E(k) < \varepsilon^{(0)}(k)$ が成り立ち, 摂動が加わった後のエネルギーは加わる前のエネルギーより小さくなる.

(b) 第 1 Brillouin ゾーン外側 $(k = k_2 > \frac{\pi}{a})$ の振る舞い

第 1 Brillouin ゾーン内側のときと同様に考えると,

$$\begin{cases} \varepsilon(k_2) \ll \varepsilon^{(0)}(k_2 + g) \\ \varepsilon(k_2) > \varepsilon^{(0)}(k_2 - g) \end{cases} \quad (1.2.85)$$

を得る. よって, $E(k) > \varepsilon^{(0)}(k)$ が成り立ち, 摂動が加わった後のエネルギーは加わる前のエネルギーより大きくなる.

以上の議論により, 結晶中の周期ポテンシャルによりバンドギャップが形成されることがわかった.

2. バンドギャップの大きさの見積もり

式(??) に $k = \pm \frac{\pi}{a}$ を代入すると発散してしまう. 以下では 2 重縮退があるときの摂動を考えバンドギャップ ΔE を求める. $k_+ := \frac{\pi}{a}$, $k_- = -\frac{\pi}{a}$ とする. $V_{kk} = 0, V_{ab} = V$ なので, 2 次摂動によるエネルギーは

$$E = \pm \frac{1}{2} \sqrt{4|V|^2} \quad (1.2.86)$$

$$= \pm V \quad (1.2.87)$$

である. よって,

$$\Delta E = 2V \quad (1.2.88)$$

を得る. また, $E = \pm V$ に対応する波動関数はそれぞれ

$$\psi_+ = \phi_{k=\pi/a} + \phi_{k=-\pi/a} \sim \cos \frac{\pi}{a} x \quad (1.2.89)$$

$$\psi_- = \phi_{k=\pi/a} - \phi_{k=-\pi/a} \sim \sin \frac{\pi}{a} x \quad (1.2.90)$$

であり, 定在波が生じる.

バンドギャップの起源は Bragg 反射である. Bragg 反射は以下の式を満たす.

$$2a \sin \theta = \lambda \quad (1.2.91)$$

今回の場合は 1 次元なので $\theta = \pi/2$ であり, 波数は $k = 2\pi/\lambda$ である. よって, Bragg 条件は

$$k = \frac{\pi}{a} \quad (1.2.92)$$

と書き換えられる. 上の条件を満たす波数のみが反射し, 定在波をつくる. \sin で表される波動関数はポテンシャルが最小となる波数で確率振幅が最大となる. \cos で表される波動関数はポテンシャルが最大となる波数で確率振幅が最大となる. よって, \sin の方はエネルギーが低くなり, \cos の方は高くなる. これによりバンドギャップが生じる.

1.2.8 練習問題

練習問題 1.5: Griffith Example 7.1

[0,a] 無限井戸型ポテンシャルに次の摂動が加わったときの 1 次摂動によるエネルギーを求めよ.

$$V_1(x) = \begin{cases} V_0, & 0 \leq x \leq a \\ 0, & \text{otherwise} \end{cases} \quad (1.2.93)$$

$$V_2(x) = \begin{cases} V_0, & 0 \leq x \leq a/2 \\ 0, & \text{otherwise} \end{cases} \quad (1.2.94)$$

$V_1(x)$ の場合

$$E_n^1(x) = \langle \psi_n^{(0)} | V_0 | \psi_n^{(0)} \rangle = V_0 \quad (1.2.95)$$

$V_2(x)$ の場合

$$E_n^1 = \frac{2V_0}{a} \int_0^{a/2} \sin^2 \left(\frac{n\pi}{a} x \right) dx = V_0/2 \quad (1.2.96)$$

練習問題 1.6: Griffith Example 7.3

2 次元調和振動子 $\hat{H}^0 = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2(\hat{x}^2 + \hat{y}^2)$ の第 1 励起状態は縮退している.

$$\psi_a^0 = \psi_0(x)\psi_1(y) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{m\omega}{\hbar} y \exp \left(-\frac{m\omega}{2\hbar}(x^2 + y^2) \right) \quad (1.2.97)$$

$$\psi_a^0 = \psi_1(x)\psi_0(y) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{m\omega}{\hbar} x \exp \left(-\frac{m\omega}{2\hbar}(x^2 + y^2) \right) \quad (1.2.98)$$

ここに摂動 $\hat{H}' = \varepsilon m\omega^2 xy$ を加える.

$$\begin{pmatrix} \omega_{aa} - E_n^1 & \omega_{ab} \\ \omega_{ba} & \omega_{bb} - E_n^1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (1.2.99)$$

を用いて摂動を加えた後の固有関数及び摂動による補正エネルギーを求めよ.

$$W_{aa} = \int \int \psi_a^0 \hat{H}' \psi_a^0 dx dy \quad (1.2.100)$$

$$= \varepsilon m\omega^2 \int |\psi_0(x)|^2 x dx \int |\psi_1(y)|^2 y dy \quad (1.2.101)$$

$$= 0 = W_{bb} \quad (1.2.102)$$

$$W_{ab} = \left[\int \psi_0(x) \varepsilon m\omega^2 x \psi_1(x) dx \right]^2 \quad (1.2.103)$$

$$= \varepsilon \frac{\hbar\omega}{2} \left[\int \psi_0(x) (\hat{a}_+ + \hat{a}_-) \psi_1(x) dx \right]^2 \quad (1.2.104)$$

$$= \varepsilon \frac{\hbar\omega}{2} \left[\int \psi_0(x) \psi_0(x) dx \right]^2 \quad (1.2.105)$$

$$= \varepsilon \frac{\hbar\omega}{2} \quad (1.2.106)$$

よって、摂動による補正エネルギーは $E_1 = \pm \varepsilon \frac{\hbar\omega}{2}$, 固有関数は

$$\psi_{\pm}^0 = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_b^0 \pm \psi_a^0) \quad (1.2.107)$$

である.

1.3 摂動 II(非定常摂動)

摂動項が時間に依存する場合の摂動 (time-dependent perturbation)⁵を扱う.
時間に依存する Schrödinger 方程式

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle \quad (1.3.1)$$

(i) $\hat{H} = \hat{H}^0$ の場合⁶

量子状態の時間発展は時間発展演算子 $e^{-i\frac{\hat{H}t}{\hbar}}$ を用いて次のように表すことができる⁷⁸.

$$|\psi(t)\rangle = e^{-i\hat{H}^0 t/\hbar} |\psi(0)\rangle \quad (1.3.2)$$

$$= \sum_n c_n(0) e^{-i\hat{H}^0 t/\hbar} |n\rangle \quad (1.3.3)$$

$$= \sum_n c_n(0) e^{-iE_n t/\hbar} |n\rangle \quad (1.3.4)$$

(ii) $\hat{H} = \hat{H}^0 + \hat{V}(t)$ の場合
 \hat{V} の効果を $c_n(t)$ に押し付け.

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t) e^{-iE_n t/\hbar} |n\rangle \quad (1.3.5)$$

とする. $c_n(t)$ が求まれば量子系の時間発展がわかる.

1.3.1 相互作用表示

非定常摂動の運動は Schrödinger 表示で

$$\begin{cases} i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = (\hat{H}^0 + \hat{V}(t)) |\psi(t)\rangle \\ |\psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t) e^{-iE_n t/\hbar} |n\rangle \end{cases} \quad (1.3.6)$$

と書ける. これを次の**相互作用表示** (interaction picture) を用いて書き直す.

相互作用表示

$$|\psi(t)\rangle_I = e^{i\hat{H}^0 t/\hbar} |\psi(t)\rangle \quad (1.3.7)$$

実際, 相互作用表示を用いると,

$$|\psi(t)\rangle_I = e^{i\hat{H}^0 t/\hbar} \sum_n c_n(t) e^{-iE_n t/\hbar} |n\rangle \quad (1.3.8)$$

⁵電磁波による摂動など

⁶ \hat{H}^0 は厳密に解ける Hamiltonian.

⁷ $|\psi(t)\rangle = e^{-i\frac{\hat{H}t}{\hbar}} |\psi(0)\rangle \approx \left(\hat{I} - i\frac{\hat{H}t}{\hbar}\right) |\psi(0)\rangle = \left(\hat{I} + t\frac{d}{dt}\right) |\psi(0)\rangle$ より確かに時間発展する, と私は解釈する.

⁸演算子が交換するときは数字と同じ扱いをしても良いと考える. 一般に, 演算子は次の BCH 公式を満たす. $e^{\hat{A}} e^{\hat{B}} = \exp\left\{\hat{A} + \hat{B} + \frac{1}{2}[\hat{A}, \hat{B}] + \dots\right\} \neq e^{\hat{A} + \hat{B}}$

$$= \sum_n c_n(t) |n\rangle \quad (1.3.9)$$

であり、式 (??) の 2 式目と同じものが得られる。
相互作用表示の時間微分を計算してみる。

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle_I = i\hbar \left(i \frac{\hat{H}^0}{\hbar} \right) e^{i\hat{H}^0 t/\hbar} |\psi(t)\rangle + i\hbar e^{i\hat{H}^0 t/\hbar} \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle \quad (1.3.10)$$

$$= e^{i\hat{H}^0 t/\hbar} \hat{V}(t) |\psi(t)\rangle \quad (1.3.11)$$

$$= e^{i\hat{H}^0 t/\hbar} \hat{V}(t) e^{-i\hat{H}^0 t/\hbar} e^{i\hat{H}^0 t/\hbar} |\psi(t)\rangle \quad (1.3.12)$$

$$= e^{i\hat{H}^0 t/\hbar} \hat{V}(t) e^{-i\hat{H}^0 t/\hbar} |\psi(t)\rangle_I \quad (1.3.13)$$

$$\equiv \hat{V}_I(t) |\psi(t)\rangle_I \quad (1.3.14)$$

Schrödinger 方程式に似た式が得られた。これを**朝永・Schwinger 方程式**という^{9 10 11 12}。

朝永・Schwinger 方程式

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle_I = \hat{V}_I(t) |\psi(t)\rangle_I \quad (1.3.15)$$

$$\hat{V}_I(t) = e^{i\hat{H}^0 t/\hbar} \hat{V}(t) e^{-i\hat{H}^0 t/\hbar} \quad (1.3.16)$$

1.3.2 $c_n(t)$ に関する連立方程式

式 (??) に左から $\langle m|$ を演算する ($\hat{H}^0 |m\rangle = E_m |m\rangle$)。
左辺は

$$\langle m| i\hbar \frac{d}{dt} \sum_n c_n(t) |n\rangle \quad (1.3.17)$$

$$= i\hbar \frac{d}{dt} c_m(t) \quad (1.3.18)$$

右辺は

$$\langle m| \hat{V}_I(t) \sum_n c_n(t) |n\rangle \quad (1.3.19)$$

$$= \sum_n c_n(t) e^{-i \frac{(E_n - E_m)t}{\hbar}} \langle m| \hat{V}(t) |n\rangle \quad (1.3.20)$$

となる。よって、非定常摂動の時間発展は以下の式を満たす。

⁹Schrödinger 描像は量子状態が時間発展するとみなす。Heisenberg 描像は物理量が時間発展するとみなす。相互作用表示はその中間であるといえる。

¹⁰朝永振一郎 (1906-1979)

¹¹Julian Schwinger (1918-1994)

¹²朝永と Schwinger は 1964 年に Richard Feynmann とともにノーベル賞を受賞。

$$\hat{H}(t) = \hat{H}^0 + \hat{V}(t)$$

$$|\psi(t)\rangle_I = \sum_n c_n(t) |n\rangle \quad (1.3.21)$$

$$i\hbar \frac{d}{dt} c_m(t) = \sum_n c_n(t) V_{mn} e^{i\omega_{mn}t} \quad (1.3.22)$$

$$V_{mn} = \langle m | \hat{V}(t) | n \rangle \quad (1.3.23)$$

$$\omega_{mn} = \frac{E_m - E_n}{\hbar} = -\omega_{nm} \quad (1.3.24)$$

これは c_n の連立方程式になっており解くことは困難である．よって近似を加える．

1.3.3 2 準位系

厳密に解くことのできる 2 準位系

$$|1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, |2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \hat{H}^0 = \begin{pmatrix} E_1 & 0 \\ 0 & E_2 \end{pmatrix} \quad (1.3.25)$$

に摂動を加える (E_1, E_2 はそれぞれ $|1\rangle, |2\rangle$ のエネルギー固有値)．摂動は次のようにする¹³．

$$\hat{V}(t) = \begin{pmatrix} 0 & \gamma e^{i\omega t} \\ \gamma e^{-i\omega t} & 0 \end{pmatrix} \quad (1.3.26)$$

よって，Hamiltonian は，

$$\hat{H} = \hat{H}^0 + \hat{V}(t) = \begin{pmatrix} E_1 & \gamma e^{i\omega t} \\ \gamma e^{-i\omega t} & E_2 \end{pmatrix} \quad (1.3.27)$$

である． t に依存する非対角項が存在するため $|1\rangle$ と $|2\rangle$ が t に依存して混ざってしまう．この系の量子状態は相互作用表示を使って，

$$|\psi(t)\rangle_I = c_1(t) |1\rangle + c_2(t) |2\rangle \quad (1.3.28)$$

と表される． $V_{11} = V_{22} = 0, V_{12} = V_{21} = \gamma e^{-i\omega t}$ であるから，

$$\begin{cases} i\hbar \frac{d}{dt} c_1 = c_2 \gamma e^{i(\omega - \omega_{21})t} \\ i\hbar \frac{d}{dt} c_2 = c_1 \gamma e^{-i(\omega - \omega_{21})t} \end{cases} \quad (1.3.29)$$

が成り立つ．次に， $\Delta\omega \equiv \omega - \omega_{21}$ とし，上の連立微分方程式を解く．2 式目を 1 式目に代入して c_1 を消去すると

$$\ddot{c}_2 + i\Delta\omega \dot{c}_2 + \left(\frac{\gamma}{\hbar}\right)^2 c_2 = 0 \quad (1.3.30)$$

$c_2(t) = e^{i\lambda t}$ を代入すると

$$\lambda^2 + \Delta\omega \lambda - \left(\frac{\gamma}{\hbar}\right)^2 = 0 \quad (1.3.31)$$

$$\lambda = -\frac{\Delta\omega}{2} \pm \sqrt{(\Delta\omega/2)^2 + (\gamma/\hbar)^2} \quad (1.3.32)$$

を得る．ここで

$$\Omega = \sqrt{(\Delta\omega/2)^2 + (\gamma/\hbar)^2} \quad (1.3.33)$$

を **Rabi 周波数** (Rabi frequency) という¹⁴¹⁵．

¹³ γ は摂動の強さを表す．

¹⁴I.I.Rabi(1898-1988)

¹⁵量子状態の振動を **Rabi 振動** (Rabi oscillation) という．

Rabi 周波数

$$\Omega = \sqrt{(\Delta\omega/2)^2 + (\gamma/\hbar)^2} \quad (1.3.34)$$

 よって、 c_2 の一般解は

$$c_2(t) = e^{-i\Delta\omega t/2} (ae^{i\Omega t} + be^{-i\Omega t}) \quad (1.3.35)$$

 となる．初期条件を $c_1(0) = 1$, $c_2(0) = 0$ とすると、

$$c_2(t) = -i \frac{\gamma}{\hbar\Omega} e^{-i\Delta\omega t/2} \sin \Omega t \quad (1.3.36)$$

である．この系の量子状態は

$$|\psi(t)\rangle_I = c_1(t) |1\rangle + c_2(t) |2\rangle \quad (1.3.37)$$

 だから、時刻 t で $|2\rangle$ に状態を見出す確率は

$$|c_2(t)|^2 = \frac{(\gamma/\hbar)^2}{\Omega^2} \sin^2 \Omega t \quad (1.3.38)$$

 である．確率が周期的に変化することがわかる．
 振幅の大きさは

$$\frac{(\gamma/\hbar)^2}{(\gamma/\hbar)^2 + (\Delta\omega/2)^2} \quad (1.3.39)$$

 と表されるので、 $\Delta\omega = \omega - \omega_{12} = 0$ のときに最大となる．つまり、摂動の周波数 ω と 2 準位のエネルギー差に由来する ω_{12} が一致したときに遷移が起こりやすい．

共鳴条件

$$\omega = \omega_{12} = \frac{E_2 - E_1}{\hbar} \quad (1.3.40)$$

1.3.4 近似解

時間に依存する摂動がある量子系の時間発展は次の式で表されることを確認した．

$$\begin{cases} |\psi(t)\rangle_I = \sum_n c_n(t) |n\rangle \\ i\hbar \frac{d}{dt} c_m(t) = \sum_n V_{mn}(t) e^{i\omega_{mn}t} c_n(t) \end{cases} \quad (1.3.41)$$

一般に式 (??) を解くことはできない．そこで近似を加える．

 $\hat{V}(t) \rightarrow \lambda \hat{V}(t)$ として $c_n(t)$ をべき級数展開する．

$$c_n(t) = c_n^0(t) + \lambda c_n^1(t) + \lambda^2 c_n^2(t) + \dots \quad (1.3.42)$$

 これを式 (??) の第 2 式に代入して整理すると λ^0 の係数比較から

$$i\hbar \frac{d}{dt} c_m^0(t) = 0 \quad (1.3.43)$$

 λ^1 の係数比較から

$$i\hbar \frac{d}{dt} c_m^1(t) = \sum_n V_{mn}(t) e^{i\omega_{mn}t} c_n^0(t) \quad (1.3.44)$$

を得る．式 (??) より、

$$c_m^0(t) = \text{const.} \quad (1.3.45)$$

 である．以下では、 $t = t_0$ から摂動 $\hat{V}(t)$ を加え始めたとする．また、 $t = t_0$ で系の量子状態が $|i\rangle$ であったとする．このとき

$$\begin{cases} c_i^0(t_0) = 1 \\ c_m^0(t_0) = 0 \quad (m \neq i) \end{cases} \quad (1.3.46)$$

である．式 (??) から 0 次の係数は定数なので

$$\begin{cases} c_i^0(t) = 1 \\ c_m^0(t) = 0 \quad (m \neq i) \end{cases} \quad (1.3.47)$$

が得られる．この系の状態は初期状態 $|i\rangle$ に依ることがわかったのでこれからは $c_m(t)$ を $c_{m,i}(t)$ と表記する．式 (??) から

$$i\hbar \frac{d}{dt} c_{m,i}^1(t) = \sum_n V_{mn}(t) e^{i\omega_{mn}t} c_{n,i}^0(t) \quad (1.3.48)$$

$$= V_{m,i}(t) e^{i\omega_{mi}t} \quad (1.3.49)$$

$$c_{m,i}^1(t) = -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t V_{m,i}(t) e^{i\omega_{mi}t} dt \quad (1.3.50)$$

である．また，系の量子状態は

$$|\psi(t)\rangle_I = \sum_n c_{n,i}(t) |n\rangle \quad (1.3.51)$$

$$\simeq \sum_n [c_{n,i}^0(t) + c_{n,i}^1(t)] |n\rangle \quad (1.3.52)$$

$$= |i\rangle + c_{i,i}^1(t) |i\rangle + \sum_{n \neq i} c_{n,i}^1(t) |n\rangle \quad (1.3.53)$$

と表される．よって

$|\psi(t_0)\rangle_I = |i\rangle$ の時間発展

$$|\psi(t)\rangle_I = (1 + c_{i,i}^1(t)) |i\rangle + \sum_{n \neq i} c_{n,i}^1(t) |n\rangle \quad (1.3.54)$$

$$c_{n,i}^1(t) = -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t V_{n,i} e^{i\omega_{ni}t} dt \quad (1.3.55)$$

が得られる．このとき，始状態 $|i\rangle$ から終状態 $|f\rangle$ ($f \neq i$) への遷移確率は

$$|\langle f | \psi(t) \rangle_I|^2 = |(1 + c_{i,i}^1(t)) \langle f | i \rangle + \sum_{n \neq i} c_{n,i}^1(t) \langle f | n \rangle|^2 = |c_{f,i}^1(t)|^2 \quad (1.3.56)$$

である．

1.3.5 一定の摂動

時刻 $t = 0$ から摂動 \hat{V} を加え始めたとする．

$$\hat{V}(t) = \begin{cases} 0 & (t \leq 0) \\ \hat{V} & (t > 0) \end{cases} \quad (1.3.57)$$

このとき

$$V_{fi}(t) = \langle f | \hat{V}(t) | i \rangle = \begin{cases} 0 & (t \leq 0) \\ \langle f | \hat{V} | i \rangle & (t > 0) \end{cases} \quad (1.3.58)$$

である．ここで $\langle f | \hat{V} | i \rangle = V_{fi}$ とする． $t = 0$ で量子状態は $|i\rangle$ であったとする．

$$c_{f,i}^1(t) = -\frac{i}{\hbar} \int_0^t V_{fi} e^{i\omega_{fi}t} dt \quad (1.3.59)$$

$$= 2i \exp\left(-i\frac{\omega_{fi}t}{2}\right) \sin\left(\frac{\omega_{fi}t}{2}\right) \quad (1.3.60)$$

よって $|i\rangle$ から $|f\rangle$ への遷移確率は

$$|c_{f,i}^1(t)|^2 = \frac{|V_{fi}|^2}{\hbar^2} \left(\frac{\sin(\omega_{fi}t/2)}{(\omega_{fi}/2)} \right)^2 \quad (1.3.61)$$

であり, $\sin(\omega_{fi}t/2)$ が 0 でないときのみ $|i\rangle$ から $|f\rangle$ への遷移が起きることがわかる. また, $\left(\frac{\sin(\omega_{fi}t/2)}{(\omega_{fi}/2)} \right)^2$ は $|\omega_{fi}| < 2\pi/t$ で有効な値をもつ. 従って, t が小さいときはこの範囲が十分広く, $\omega_{fi} \neq 0$ の状態への遷移が起こりうる. しかし, t が大きいときは $\omega_{fi} \simeq 0$ の状態への遷移しか起きない. 通常は $t \rightarrow \infty$ と考えてよい.

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \left(\frac{\sin(\omega t/2)}{\omega t/2} \right)^2 = 2\pi t \delta(\omega) \quad (1.3.62)$$

を使うと¹⁶,

$$\lim_{t \rightarrow \infty} |c_{f,i}^1(t)|^2 = \frac{|V_{fi}|^2}{\hbar^2} 2\pi t \delta(\omega_{f,i}) \quad (1.3.63)$$

$$= \frac{2\pi}{\hbar} |V_{fi}|^2 \delta(E_f - E_i) t \quad (1.3.64)$$

が得られる. よって, 単位時間当たりの $|i\rangle$ から $|f\rangle$ への遷移確率は

$$\omega_{i \rightarrow f} = |c_{f,i}^1(t)|^2 / t \quad (1.3.65)$$

$$= \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle f | \hat{V} | i \rangle \right|^2 \delta(E_f - E_i) \quad (1.3.66)$$

である. これを **Fermi の黄金律** という¹⁷.

Fermi の黄金律

$$\omega_{i \rightarrow f} = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle f | \hat{V} | i \rangle \right|^2 \delta(E_f - E_i) \quad (1.3.67)$$

例題 1.9

電子の弾性散乱弾性散乱では散乱前後で粒子のエネルギーが保存される. 電子のエネルギーは

$$E_{\mathbf{k}'} = \frac{\hbar^2 |\mathbf{k}'|^2}{2m} \quad (1.3.68)$$

と表される. よって, 終状態は多く存在する. 始状態 i から終状態グループ $\{f\}$ への遷移確率を求める.

$$\omega_{i \rightarrow \{f\}} = \sum_f \omega_{i \rightarrow f} \quad (1.3.69)$$

$$= \sum_f \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle f | \hat{V} | i \rangle \right|^2 \delta(E_f - E_i) \quad (1.3.70)$$

$$= \frac{2\pi}{\hbar} \overline{\left| \langle f | \hat{V} | i \rangle \right|^2} \sum_f \delta(E_f - E_i) \quad (1.3.71)$$

$$= \frac{2\pi}{\hbar} \overline{\left| \langle f | \hat{V} | i \rangle \right|^2} \rho(E_f) \quad (1.3.72)$$

$\overline{\left| \langle f | \hat{V} | i \rangle \right|^2}$ は散乱体の性質を, 状態密度 $\rho(E_f)$ は物質の性質を反映している. この関係も Fermi の黄金律という.

¹⁶ $\delta(ax) = \frac{1}{|a|} \delta(x)$

¹⁷ Enrico Fermi(1901-1954)

1.3.6 調和摂動

時間に依存する摂動を調和摂動という。以下の摂動を考える¹⁸。

$$\hat{V}(t) = \begin{cases} 0 & (t \leq 0) \\ 2V \cos \omega t & (t > 0) \end{cases} \quad (1.3.73)$$

$2V \cos \omega t = V(e^{i\omega t} + e^{-i\omega t})$ であるので,

$$c_{f,i}^1(t) = \frac{i}{\hbar} \int_0^t \langle f | \hat{V} | i \rangle (e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}) e^{i\omega_{fi}t} dt \quad (1.3.74)$$

$$= -\frac{V_{fi}}{\hbar} \left(\frac{e^{i(\omega_{fi}+\omega)t} - 1}{\omega_{fi} + \omega} + \frac{e^{i(\omega_{fi}-\omega)t} - 1}{\omega_{fi} - \omega} \right) \quad (1.3.75)$$

を得る。ここで $V_{fi} = \langle f | \hat{V} | i \rangle$ とした。

(i) $\omega_{fi} - \omega \approx 0$ のとき

式 (??) の第 2 項は第 1 項より十分大きい。よって,

$$c_{f,i}^1(t) \approx -\frac{V_{fi}}{\hbar} \frac{e^{i(\omega_{fi}-\omega)t} - 1}{\omega_{fi} - \omega} = -\frac{V_{fi}}{\hbar} e^{i\frac{\omega_{fi}-\omega}{2}t} \frac{\sin \frac{\omega_{fi}-\omega}{2}t}{\frac{\omega_{fi}-\omega}{2}} \quad (1.3.76)$$

と近似できる。このとき $|i\rangle \rightarrow |f\rangle$ の遷移確率は

$$|c_{f,i}^1(t)|^2 = \frac{V_{fi}^2}{\hbar^2} \frac{\sin^2 \frac{\omega_{fi}-\omega}{2}t}{\left(\frac{\omega_{fi}-\omega}{2}\right)^2} \quad (1.3.77)$$

$\frac{\sin^2 \frac{\omega_{fi}-\omega}{2}t}{\left(\frac{\omega_{fi}-\omega}{2}\right)^2}$ は $t \rightarrow \infty$ で $2\pi t \delta(\omega_{fi} - \omega) = 2\pi t \hbar \delta(E_f - E_i - \hbar\omega)$ と近似できるので単位時間当たりの遷移確率は

$$\omega_{f \rightarrow i} = \frac{|c_{f,i}^1(t)|^2}{t} = \frac{2\pi}{\hbar} |V_{fi}|^2 \delta(E_f - E_i - \hbar\omega) \quad (1.3.78)$$

である。これも Fermi の黄金律という。 $E_f = E_i + \hbar\omega$ へと遷移することがわかる。

(ii) $\omega_{fi} + \omega \approx 0$ のとき式 (??) の第 1 項が支配的となる。上記の議論を $\omega \rightarrow -\omega$ と置き換えて繰り返すと単位時間当たりの遷移確率として

$$\omega_{i \rightarrow f} = \frac{|c_{f,i}^1(t)|^2}{t} = \frac{2\pi}{\hbar} |V_{fi}|^2 \delta(E_f - E_i + \hbar\omega) \quad (1.3.79)$$

を得る。 $E_f = E_i - \hbar\omega$ へと遷移することがわかる。

1.3.7 電磁場中の電子

電磁場中の電子の運動方程式は

$$m \frac{d\mathbf{v}}{dt} = -e(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}) \quad (1.3.80)$$

である。電磁場中の電子の Hamiltonian は

電磁場中の電子の Hamiltonian

$$H = \frac{1}{2m} (\mathbf{p} + e\mathbf{A})^2 - e\phi \quad (1.3.81)$$

である。ここで \mathbf{A} はベクトルポテンシャルで

$$\mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} - \nabla \phi, \quad \mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} \quad (1.3.82)$$

を満たす。

本節では $U(1)$ ¹⁹Gauge 対称性を扱い説明し電磁場の起源を探る。

¹⁸光のイメージ

¹⁹Unitary

1.3.7.1 大域的 Gauge 変換

波動関数 $\psi(\mathbf{r})$ を次のように変換する.

$$\psi(\mathbf{r}) \rightarrow \psi'(\mathbf{r}) = e^{i\alpha} \psi(\mathbf{r}) \quad (1.3.83)$$

これを Schrödinger 方程式に代入する.

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi' = e^{i\alpha} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi \quad (1.3.84)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi \rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi' = -e^{i\alpha} \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi \quad (1.3.85)$$

よって,

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi' = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi' \quad (1.3.86)$$

が成り立つことがわかる. また期待値も

$$\langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle = \langle \psi' | \hat{A} | \psi' \rangle \quad (1.3.87)$$

である. つまり, 物理は大域的 Gauge 変換に対して不変である.

1.3.7.2 局所的 Gauge 変換

波動関数 $\psi(\mathbf{r})$ を次のように変換する.

$$\psi(\mathbf{r}) \rightarrow \psi'(\mathbf{r}) = e^{i\alpha(\mathbf{r})} \psi(\mathbf{r}) \quad (1.3.88)$$

この場合, 運動量が Gauge 不変でなくなってしまう. 例えば波動関数の微分を計算すると

$$\nabla \psi'(\mathbf{r}) = i(\nabla \alpha(\mathbf{r}) e^{i\alpha(\mathbf{r})}) \psi(\mathbf{r}) + e^{i\alpha(\mathbf{r})} \nabla \psi(\mathbf{r}) = e^{i\alpha(\mathbf{r})} (\nabla + i \nabla \alpha(\mathbf{r})) \psi(\mathbf{r}) \quad (1.3.89)$$

余分な項が加わってしまう. よって,

$$\begin{cases} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi' \neq -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi' \\ \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle \neq \langle \psi' | \hat{A} | \psi' \rangle \end{cases} \quad (1.3.90)$$

である. したがって, 局所 Gauge 変換に対して物理は不変ではない.

局所 Gauge 不変性を基本原理とする物理を再構築する.

まずは, 微分を次の共変微分として再定義する.

$$\mathbf{D} = \nabla + i \frac{e}{\hbar} \mathbf{A} \quad (1.3.91)$$

ただし, ψ と \mathbf{A} は Gauge 変換により

$$\psi \rightarrow \psi' = e^{i\alpha(\mathbf{r})} \psi \quad (1.3.92)$$

$$\mathbf{A} \rightarrow \mathbf{A}' = \mathbf{A} - \frac{\hbar}{e} \nabla \alpha(\mathbf{r}) \quad (1.3.93)$$

このように微分を定義すると,

$$\mathbf{D}' \psi'(\mathbf{r}) = e^{i\alpha(\mathbf{r})} \mathbf{D} \psi(\mathbf{r}) \quad (1.3.94)$$

つまり, 局所 Gauge 変換は波動関数の微分を

$$\mathbf{D} \psi(\mathbf{r}) \rightarrow e^{i\alpha(\mathbf{r})} \mathbf{D} \psi(\mathbf{r}) \quad (1.3.95)$$

と変換することがわかる. これは大域的 Gauge 変換による $\nabla \psi(\mathbf{r}) \rightarrow e^{i\alpha} \nabla \psi(\mathbf{r})$ と同じ形をしている.

次に, $\alpha(\mathbf{r})$ に時間依存性を持たせ, $\alpha(\mathbf{r}, t)$ とする. つまり波動関数を

$$\psi \rightarrow \psi' = e^{i\alpha(\mathbf{r}, t)} \psi \quad (1.3.96)$$

と変換する. このとき, 時間についての偏微分を

$$D_t = \frac{\partial}{\partial t} - i \frac{e}{\hbar} \phi \quad (1.3.97)$$

と定義する。ただし,

$$\phi \rightarrow \phi' + \frac{\hbar}{e} \frac{\partial}{\partial t} \alpha(\mathbf{r}, t) \quad (1.3.98)$$

である。以上で定義した共変微分と時間微分を用いると Schrödinger 方程式は

$$i\hbar D'_t \psi' = -\frac{\hbar^2}{2m} \mathbf{D}'^2 \psi' \quad (1.3.99)$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\nabla + i \frac{e}{\hbar} \mathbf{A} \right)^2 \psi - e\phi \psi \quad (1.3.100)$$

$$= \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} + i \frac{e}{\hbar} \mathbf{A} \right)^2 - e\phi \right] \psi \quad (1.3.101)$$

と変換される。よって,

局所 Gauge 変換に対して不変な Schrödinger 方程式

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = \left[\frac{1}{2m} (\mathbf{p} + e\mathbf{A})^2 - e\phi \right] \psi \quad (1.3.102)$$

を得る。

以上の流れをまとめると, 局所 Gauge 不変性を要請した。それにより Gauge 場 \mathbf{A} が導入された。よって, 電磁場の起源は局所 Gauge 不変性であるといえる。

Chapter 2

散乱理論

2.1 立体角

今後の議論のために**立体角**を導入する．立体角とは1点を中心としたときの広がり具合を表す指標である．2次元の場合，微小円弧と半径の比は角度にのみ依り， r に依らない．つまり，

$$\frac{dl_1}{r_1} = \frac{dl_2}{r_2} = \frac{d\theta}{1} \quad (2.1.1)$$

が成り立つ．この関係から平面角 $d\theta = \frac{dl}{r}$ を定義する．これを3次元に拡張する．単位球上の面積を考えると，

$$\frac{dS_1}{r_1^2} = \frac{dS_2}{r_2^2} = \frac{dS}{1} \quad (2.1.2)$$

である．ここから立体角を $d\Omega = \frac{dS}{r^2}$ と定義する．また，これを球座標表示に変換すると，

$$d\Omega = \frac{dS}{r^2} = \frac{r^2 \sin\theta d\theta d\phi}{r^2} = \sin\theta d\theta d\phi \quad (2.1.3)$$

である．

2.2 散乱断面積

単位時間単位面積当たり N 個の粒子を z 軸方向に入射する．単位時間内に散乱体からの位置 (r, θ, ϕ) にある面積 dS の検出器に到達する粒子数は

$$dN \propto N \frac{dS}{r^2} = N d\Omega \quad (2.2.1)$$

を満たす．比例係数を $\sigma(\theta, \phi)$ とする．

$$dN = \sigma(\theta, \phi) N d\Omega \quad (2.2.2)$$

この $\sigma(\theta, \phi)$ を**微分断面積**という．散乱が z 軸まわりに軸対称なとき， ϕ 依存性を取り除き $\sigma(\theta, \phi) = \sigma(\theta)$ とできる．このとき，全断面積を式 (??) のように定義する．

$$\sigma^{\text{tot}} = \int \sigma(\theta) d\Omega = 2\pi \int_0^\pi \sigma(\theta) \sin\theta d\theta \quad (2.2.3)$$

2.3 古典力学における散乱

z に沿って粒子を単位時間単位面積当たり N 個入射する． z 軸から距離 b (衝突パラメータ)，角度 $d\phi$ ，面積 dS' のスリットを単位時間当たり通過する粒子数は

$$N dS' = N d\phi (b d\phi) \quad (2.3.1)$$

を満たす。また、単位時間に検出器に到達する粒子数は微分断面積の定義から、

$$dN = \sigma(\theta) N d\Omega \quad (2.3.2)$$

である。古典力学ではこれらは必ず一致するため、

$$\sigma(\theta) N d\Omega = N d\phi (b d\phi) \quad (2.3.3)$$

を得る。よって、微分断面積は

$$\sigma(\theta) = \frac{1}{\sin \theta} b \left| \frac{db}{d\theta} \right| \quad (2.3.4)$$

と表される。

例題 2.1: 剛体球

散乱体を半径 a の剛体球

$$V(r) = \begin{cases} \infty & (r < a) \\ 0 & (r > a) \end{cases} \quad (2.3.5)$$

とする。衝突パラメータを b 、粒子が散乱体の角度 ϕ の位置で散乱し、その散乱角を θ とする。これらは

$$\begin{cases} 2\phi + \theta = \pi \\ b = a \sin \phi \end{cases} \quad (2.3.6)$$

を満たすため、

$$b = a \cos \frac{\theta}{2} \quad (2.3.7)$$

を得る。よって、微分断面積は

$$\sigma(\theta) = \frac{1}{\sin \theta} b \left| \frac{db}{d\theta} \right| \quad (2.3.8)$$

$$= \frac{a^2}{4} \quad (2.3.9)$$

となる。 θ に依存しない等方散乱であることがわかる。また、全断面積は

$$\sigma^{\text{tot}} = \int \sigma(\theta) d\Omega = \pi a^2 \quad (2.3.10)$$

である。剛体球の断面積と一致する。

2.4 量子力学における散乱

Chapter 3

相對論的量子論