

# 量子力学III

戸部和弘

2024 年 10 月 31 日

## 目次

1	時間による摂動論	1
1.1	時間に依存しないポテンシャルの場合（定常状態）	2
1.2	時間に依存するポテンシャルの場合	2
1.3	相互作用表示	3
1.4	崩壊幅寿命	6

## 量子力学の基礎

単位を取りたい場合は中間レポートまたは期末試験を出さなければ、欠席扱いにする。中間レポートまたは、期末試験を出す場合は、単位を取得することができる。

量子力学演習Ⅲは、演習問題をやりながらやってほしい。なのでオススメ

### 量子力学の基礎

授業内容としては、

**時間による摂動論** 定数の摂動、調和振動、崩壊幅、（寿命）

**古典的輻射場との相互作用への応用** 古典的輻射場との相互作用への応用

**水素原子中の電子の遷移**  $2p \rightarrow 1s$  遷移

**同種粒子** 2粒子径のボゾンとフェルミオン、パウリの排他率

**ヘリウム原子** 対称性と選択則

**近似法・変分法**

**散乱問題** ・ ボルン近似

- ・ 散乱断面積
- ・ 部分波展開、位相のずれ、光学定理

## 1 時間による摂動論

1 時間による摂動論量子力学の問題を解くとは、シュレディンガー方程式を解くことであるが、ほとんどの場合生アックに解くことが出来ない。そこで、近似的に解く方法が重要である。

さて、シュレディンガー方程式は

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \lambda \hat{H}_I$$

としよう。ただし、 $\hat{H}_0 \gg \lambda \hat{H}_I$  で、 $\hat{H}_0$  の解を知っているとき、

$$\hat{H}_0 \psi_n = E_n^{(0)} \psi_n$$

となる。古典力学は、 $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$  となるが、 $\hbar \rightarrow 0$  のときである。WKB 近似は、古典力学に  $\hbar$  の寄与を取り入れることである。

## 1.1 時間に依存しないポテンシャルの場合（定常状態）

シュレディンガー方程式は時間による場合は、

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = \hat{H} \Psi, \quad \hat{H} = \frac{1}{2m} \hat{\mathbf{P}}^2 + V(\mathbf{x})$$

となる。このときに、 $\Psi(t) = T(t)\Psi(\mathbf{x})$  から、

$$\begin{aligned} i\hbar \left( \frac{\partial T(t)}{\partial t} \right) \psi(\mathbf{x}) &= \hat{H} \psi(\mathbf{x}) T(t) \\ i\hbar \frac{1}{T(t)} \left( \frac{dT(t)}{dt} \right) &= \frac{1}{\psi} \hat{H} \psi(\mathbf{x}) = E \end{aligned}$$

となるために、

$$\hat{H} \psi(\mathbf{x}) = E \psi(\mathbf{x})$$

となり、 $\hat{H}$  の固有値問題である。この解を、 $n = 1, 2, 3, \dots$  とすると、

$$\hat{H} \psi_n(\mathbf{x}) = E_n \psi_n(\mathbf{x})$$

となり、ここから、時間による摂動論は、

$$\frac{dT_n(t)}{dt} = -\frac{i}{\hbar} E_n T_n(t)$$

となることから、 $T_n(t) = A e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t}$  であり、

$$\Psi(\mathbf{x}, t) = \sum_n C_n \exp\left(-\frac{i E_n t}{\hbar}\right) \psi_n(\mathbf{x})$$

となる。ここでは、 $C_n$  は時間  $t$  に依らない値になっている。

## 1.2 時間に依存するポテンシャルの場合

相互作用表示を用いる。時間依存性がないハミルトニアンと時間依存性があるハミルトニアンの足し合わせとしよう。

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

の系を考える。

この時の解が、

$$\Psi(t) = \sum_n C_n(t) \exp\left(-\frac{i E_n t}{\hbar}\right) \psi_n(\mathbf{x})$$

となりそうな直観と思おう。これは本当なのか？ もしこれが本当ならば、この確率が時間依存することになる。つまりは、

$$\psi_n \xrightarrow{t} \psi_m (n \neq m)$$

となる。つまり、 $C_1 = 1$  という状態を得たら、他の状態に移るということは無い。 $C$  に時間依存性があるということは、遷移という現象がおこる。

### 1.3 相互作用表示

相互作用表示について考える。今までの表示はシュレディンガー表示であるシュレディンガー表示としては、

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_s(t) = \hat{H} \psi_s(t)$$

となり、物理量  $X$  の演算子を  $X_s$  と表記する。

この解を形式的に書くと、

$$\psi_s(t) = \exp\left(-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}\right) \psi_s(0)$$

となる。

$X$  の時刻  $t$  における期待値としては、

$$\bar{X} = \int d^3x \psi_s^\dagger \hat{X}_s \psi_s$$

となる。それに対して、相互作用表示とは何か？ これをディラック表示（Dirac 表示）ともよばれる。

$$\psi_s(t) = \exp\left[-\frac{i\hat{H}_0 t}{\hbar}\right] \psi_I(t)$$

相互作用表示とシュレディンガー表示の関係を関連付けている式になっている。相互作用前のハミルトニアンを考えている。

$$\hat{X}_I(t) = \exp\left[\frac{i\hat{H}_0 t}{\hbar}\right] \hat{X}_S \exp\left[-i\frac{\hat{H}_0 t}{\hbar}\right]$$

としよう。すると  $X$  の時刻における期待値は

$$\begin{aligned} \bar{X} &= \int d^3x \psi_s^\dagger \hat{X}_S \psi_s \\ &= \int d^3x \psi_I^\dagger \exp\left[\frac{i\hat{H}_0 t}{\hbar}\right] \exp\left[-i\frac{\hat{H}_0 t}{\hbar}\right] \hat{X}_I \exp\left[i\frac{\hat{H}_0 t}{\hbar}\right] \exp\left[-\frac{i\hat{H}_0 t}{\hbar}\right] \psi_I \\ &= \int d^3x \psi_I^\dagger \hat{X}_I \psi_I \end{aligned}$$

相互作用表示の波動関数はどんな関係を満たすのか？

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_t &= i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \left( e^{\frac{i\hat{H}_0 t}{\hbar}} \psi_s(t) \right) \\ &= -\hat{H}_0 \exp\left(\frac{i\hat{H}_0 t}{\hbar}\right) \psi_s(t) + \exp\left(\frac{i\hat{H}_0 t}{\hbar}\right) i\hbar \frac{\partial \psi_s}{\partial t} \\ &= -\hat{H}_0 \exp\left(\frac{i\hat{H}_0 t}{\hbar}\right) \psi_s(t) + \exp\left(\frac{i\hat{H}_0 t}{\hbar}\right) (\hat{H}_0 + \hat{V}) \psi_s(t) \\ &= V_I(t) \psi_I(t) \end{aligned}$$

さてこれで、 $\hat{X}_I$  について微分すると、

$$\begin{aligned}\frac{d\hat{X}_I}{dt} &= \frac{i\hat{H}_0}{\hbar}\hat{X}_I - \hat{X}_I\frac{i\hat{H}_0}{\hbar} \\ &= \frac{i}{\hbar}[\hat{H}_0, \hat{X}_I] \\ &= -\frac{i}{\hbar}[\hat{X}_I, \hat{H}_0]\end{aligned}$$

となる。

まとめると、メインのハミルトニアン の時間依存性は演算子の外に出しておいて、そのあとに時間依存する摂動について考えてみる。

相互作用表示の波動関数  $\psi_I(t)$  を

$$\begin{aligned}\hat{H}_0\psi_n &= E_n\psi_n \\ \psi_I(t) &= \sum_n C_n(t)\psi_n \\ \psi_s(t) &= \exp\left(-\frac{i\hat{H}_0 t}{\hbar}\right)\psi_I(t) \\ &= \sum_n C_n(t)e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}}\psi_n(\mathbf{x})\end{aligned}$$

となり、よさそうなものになる。

さてこの時に、 $\psi_i$  が満たすべき方程式は、

$$\begin{aligned}i\hbar\frac{\partial\psi_I}{\partial t} &= \hat{V}_I\psi_I(t) \\ i\hbar\sum_n\frac{\partial C_n(t)}{\partial t}\psi_n &= \sum_n C_n(t)\hat{V}_I\psi_n\end{aligned}$$

となり、 $\int d^3x\psi_m^\dagger\psi = \delta_{nm}$  となり、 $\psi_m^\dagger$  を左からかけて積分すると、

$$\begin{aligned}i\hbar\sum_n\frac{\partial C_n(t)}{\partial t}\int d^3x\psi_m^\dagger\psi_n &= \sum_n C_n(t)\int d^3x\psi_m^\dagger\hat{V}_I\psi_n \\ i\hbar\frac{\partial C_m(t)}{\partial t} &= \sum_n C_n(t)\int d^3x\psi_m^\dagger\hat{V}_I\psi_n \\ \int d^3x\psi_m^\dagger\hat{V}_I\psi_n &= \int d^3x\exp\left(\frac{i(E_n - E_m)}{\hbar}\right)\psi_m^\dagger\hat{V}\psi_n\end{aligned}$$

となる。ここから、 $\omega_{mn} = \frac{E_m - E_n}{\hbar} = -\omega_{nm}$  として、 $V_{nm} = \int d^3x\psi_m^\dagger V\psi_n$  となり、 $V_{nm}(t)e^{i\omega_{mn}t} = \bar{V}$  となることから、

$$i\hbar\frac{dC_m(t)}{dt} = \sum_n \bar{V}_{mn}C_n(t)$$

これを解こう！！

■調和振動 調和振動として、

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

となる。この時の、 $\hat{V}$  は

$$\hat{V}(t) = \hat{F}e^{i\omega t} + \hat{F}^\dagger e^{-i\omega t}$$

とんまり、初期条件として、 $t=0$  で  $\psi_0$  にあったとする。この時に、

$$\psi_I(t) = \sum_n C_n(t) \psi_n$$

暗る。 $t=0$  では、 $t=0$  で  $C_i = 0$  そのほかはゼロである。

ゼロ次元では、

$$C_{[}^{(0)} i(0)] = 1 \quad C_n^{(0)}(0) = 0 \quad (n \neq i)$$

となる。

一次では、

$$C_m^{(1)}(t) = \frac{1}{i\hbar} \int_0^t dt' \bar{V}_{mn} C_n^{(0)}(t')$$

となり、

$$\bar{V}_{mi}(t') = V_{mi} e^{i\omega_{mi} t'} = V_{mi} e^{i\omega_{mi} t}$$

となり、

$$\omega_{mi} = \frac{E_m - E_i}{\hbar}$$

となる。

さてこの時に、

$$\begin{aligned} V_{mi}(t) &= \int d^3x \psi_m^\dagger \hat{V} \psi_i \\ F_{mi} &= \int d^3x \psi_m^\dagger \hat{F} \psi_i \\ F_{mi}^\dagger &= \int d^3x \psi_m^\dagger \hat{F}^\dagger \psi_i \end{aligned}$$

となる。これを計算することによって、

$$C_n^{(1)} = \frac{-2i}{\hbar} \left[ F_m e^{i\frac{(\omega + \omega_{ni})t}{2}} \frac{\sin\left(\frac{\omega_{ni} + \omega}{2}t\right)}{\omega_m + \omega} + F_m^\dagger e^{i\frac{(\omega_m - \omega)t}{2}} \frac{\sin\left(\frac{\omega_{ni} - \omega}{2}t\right)}{\omega_{mi} - \omega} \right]$$

となる。

さてこれを絶対値の二乗をとってあげると、確率になるはずである。

$$|C_m^{(1)}(t)|^2 = \frac{4}{\hbar^2} \left[ |F_{mi}|^2 \frac{\sin^2\left(\frac{\omega_{mi} + \omega}{2}t\right)}{(\omega_m + \omega)^2} + |(F^\dagger)_m|^2 \frac{\sin^2\left(\frac{\omega_{mi} - \omega}{2}t\right)}{(\omega_{mi} - \omega)^2} + \left\{ F_{mi}(F^\dagger)_{mi} + F_{mi}^* F_{mi}^\dagger e^{i\omega t} \times \frac{\sin((\omega_{mi} + \omega)/2) \sin((\omega_{mi} - \omega)/2)}{(\omega_{mi} + \omega)(\omega_{mi} - \omega)} \right\} \right]$$

となる。

$t$  が十分に大きいときに、

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

となる。

この時に、

$$\begin{aligned}\frac{\sin^2\left(\frac{\omega_m+\omega}{2}t\right)}{(\omega_m+\omega)^2} &= \frac{\sin\left(\frac{\omega_m+\omega}{2}t\right)}{\pi\left(\frac{\omega_m+\omega}{2}\right)} \frac{\pi}{2} \frac{\sin\left(\frac{\omega_m+\omega}{2}t\right)}{\omega_m+\omega} \\ &\rightarrow \delta\left(\frac{\omega_m+\omega}{2}\right) \frac{\pi}{2} \left(\frac{t}{2}\right) \\ &= \delta(\omega_m+\omega) \frac{\pi t}{2}\end{aligned}$$

となる。ここで、

$$\sin\left(\frac{\omega_m+\omega}{2}t\right) = \frac{\omega_m+\omega}{2}t$$

となる。また、

$$\frac{\sin^2\left(\frac{\omega_m-\omega}{2}t\right)}{(\omega_m-\omega)^2} = \delta(\omega_m-\omega) \frac{\pi t}{2}$$

となり、

$$\frac{\sin\left(\frac{\omega_m+\omega}{2}\right)\sin\left(\frac{\omega_m-\omega}{2}\right)}{(\omega_m+\omega)(\omega_m-\omega)} = \frac{\pi^2}{4} (\delta(\omega_m+\omega)\delta(\omega_m-\omega)) \rightarrow 0$$

となる。

以上より、

$$|C_n(t)^{(1)}|^2 = \frac{2\pi}{\hbar} t |F_{mi}|^2 \delta(E_m - E_i + \hbar\omega) + |F_{mi}^\dagger|^2 \delta(E_m - E_i - \hbar\omega)$$

となる。

単位時間当たりの遷移確率  $\omega_{i \rightarrow m}$  は、

$$\begin{aligned}\omega_{i \rightarrow m} &= \frac{|C_m^{(1)}|^2}{t} \\ &= \frac{2\pi}{\hbar} |F_{mi}|^2 \delta(E_m - E_i + \hbar\omega) + |F_{mi}^\dagger|^2 \delta(E_m - E_i - \hbar\omega)\end{aligned}$$

となり、

一項目は、

$$E_m = E_i - \hbar\omega$$

$E_m$  は  $E_i$  よりも低いエネルギー状態である。つまりそれだけ遷移したと考えることが出来る。これを誘導放出という。

第二項としては、

$$E_m = E_i + \hbar\omega$$

つまり  $\hbar\omega$  だけのエネルギーを吸収したと考えることが出来る。

## 1.4 崩壊幅寿命

初期状態  $i$  での  $\psi_i$  の状態に残っている確率としては、 $|C_i(t)|^2$  となり、状態  $E_m$  への遷移確率は  $|C_m(t)|^2$  となる。この突起、例として定数振動を考えてみよう。

■例: 定数振動 定数振動として、

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

の時、

$$\hat{V} = \begin{cases} \hat{V} & t > 0 \\ 0 & t < 0 \end{cases}$$

となるときに、初期条件として、

$$\psi_I = \alpha(t)\psi_i + \sum_{n \neq i} C_n(t)\psi_n$$

となる。時刻  $t$  において、 $f$  の状態として、

$$|C_{f't}^{(1)}|^2 = 4|V_{fi}|^2 \frac{\sin^2\left(\frac{E_f - E_i}{2}t\right)}{(E_f - E_i)^2}$$

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

となる。ここでは確率の保存を用いて、求めよう。この時、状態  $i$  にいる場合には、 $|\alpha(t)|^2$  となる。

用意された状態も存在する。確率の保存をすると  $t = 0$  の場合には、

$$\int d^3x \psi_i^\dagger \psi_j = \delta_{ij}$$

となる。

$$\int \psi_I^* \hat{V} \psi_I = 1$$

と規格化すると、

$$\int d^3x \left( a^*(t)\psi_i^* + \sum_{n \neq i} C_n^* \psi_n^* \right) \left( a^*(t)\psi_i^* + \sum_{n \neq i} C_n^* \psi_n^* \right) = |a(t)|^2 + \sum_{n \neq i} |C_n(t)|^2 = 1$$

以上から、

$$|a(t)|^2 = 1 - \sum_{n \neq i} |C_n(t)|^2$$

$$= 1 - \sum_{n \neq i} \omega_{i \rightarrow n} t$$

そこで崩壊幅を  $\Gamma_i$  とすると、

$$\Gamma_i = \sum_{n \neq i} \omega_{i \rightarrow n}$$

となる。この時、

$$a(t) = e^{i\delta} \left( 1 - \frac{\Gamma_i}{2\hbar} t \right)$$

$$= e^{i\delta} e^{-\frac{\Gamma_i}{2\hbar} t}$$

となる。この結果が知りたい結果だった。 $\left( 1 - \frac{\Gamma_i}{2\hbar} t \right)$  の部分が第一次摂動までしかないとして、それを想像を働かせてそれが無限項あると考えておくとよい。



その時に、 $\langle i | \hat{V} | i \rangle = e^{-\frac{\Gamma_i}{2\hbar}t}$  となる。

$$\Delta_i = V_{ii} - P \sum_{n \neq i} \frac{|V_{ni}|^2}{E_n - E_i}$$

この時に、

$$|a(t)|^2 = e^{-\frac{\Gamma_i}{\hbar}t} = e^{-\frac{t}{\tau_i}}$$

となる。不安定な状態や粒子は特有の平均寿命を持つ。指数法則に従って崩壊していく。崩壊幅は  $\Gamma_i$  として、 $\tau_i = \frac{\hbar}{\Gamma}$  となり平均寿命とする。

$$BR(i \rightarrow f) = \frac{\omega_{i \rightarrow f}}{\left(\frac{\Gamma}{\hbar}\right)}$$

となり崩壊分岐比となる。これを足し上げれば、

$$\sum_f BR(i \rightarrow f) = 1$$

となるはずである。

遷移する確率が存在するならば、計算することで崩壊幅を計算することが出来ればとても良い。安定というのは崩壊しないのは、その状態の寿命を出すことが出来る。

崩壊幅を  $\Gamma_i$  としており、

$$\psi_I(t) = a(t)\psi_i + \sum_{n \neq i} C_f(t)\psi_f$$

をシュレディンガー表示にすると、

$$\psi_s = e^{-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}} \psi_I(t) = a(t)e^{-i\frac{E_i}{\hbar}t}\psi_i + \sum_{f \neq i} C_f(t)e^{-\frac{iE_f}{\hbar}t}\psi_f$$

となる。ここから、

$$\begin{aligned} \varphi(t) &= a(t)e^{-\frac{iE_i}{\hbar}t} \\ &= e^{-\frac{i\Delta_i}{\hbar}t} e^{-\frac{\Gamma_i}{2\hbar}t} e^{-\frac{iE_i}{\hbar}t} \\ E_i &= E_i + \Delta_i \\ \varphi(t) &= e^{-\frac{iE_i}{\hbar}t} e^{-\frac{\Gamma_i}{2\hbar}t} \end{aligned}$$

となり、 $t < 0, \varphi(t) = 0$  として、 $\varphi(t)$  のフーリエ変換

$$\begin{aligned} f(E) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(t) e^{iEt\hbar} dt \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^{\infty} dt \exp\left(\frac{i}{\hbar}(E - \Delta E + \frac{i\Gamma_i}{2})t\right) \\ &= \frac{i\hbar}{\sqrt{2\pi}} \frac{1}{E - \Delta E_i + \frac{i\Gamma_i}{2}} \end{aligned}$$

となり、

$$|f(E)|^2 = \frac{\hbar^2}{2\pi} \frac{\Gamma_i}{(E - \Delta E_i)^2 + \left(\frac{\Gamma_i}{2}\right)^2}$$

となる。