問題 1　量子力学: 摂動論・断熱近似

1-1

$$
\begin{aligned}
(H-E_2 I)\left|2\right\rangle &= V\left|1\right\rangle + E_2\left|2\right\rangle - E_2\left|2\right\rangle \\
\left\langle 2\right|(H-E_2 I)\left|2\right\rangle &= V\left\langle 2|1\right\rangle = 0 \\
(H-E_2 I)^2\left|2\right\rangle &= V^2\left|2\right\rangle + E_2\left|2\right\rangle - E_2\left|2\right\rangle \\
\left\langle 2\right|(H-E_2 I)^2\left|2\right\rangle &= V^2\left\langle 2|2\right\rangle = V^2
\end{aligned}
\tag{1-1.1}
$$

1-2

固有値方程式より

$$
\begin{aligned}
0 &= |H-EI| = (E_1-E)(E_2-E) - V^2 = E^2 - (E_1+E_2)E + E_1E_2 - V^2 \\
E &= \frac{E_1+E_2}{2} \pm \sqrt{\frac{(E_1-E_2)^2}{4} + V^2}
\end{aligned}
\tag{1-2.1}
$$

また、固有ベクトルは

$$
\begin{pmatrix} E_1-E_\pm & V \\ V & E_2-E_\pm \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \left\langle 1|\psi_\pm\right\rangle \\ \left\langle 2|\psi_\pm\right\rangle \end{pmatrix} = 0
\tag{1-2.2}
$$

より、

$$
\begin{aligned}
0 &= (E_1-E_\pm)\left\langle 1|\psi_\pm\right\rangle + V\left\langle 2|\psi_\pm\right\rangle \\
\frac{\left\langle 2|\psi_\pm\right\rangle}{\left\langle 1|\psi_\pm\right\rangle} &= \frac{E_\pm - E_1}{V} \\
\frac{\left\langle 2|\psi_+\right\rangle}{\left\langle 1|\psi_+\right\rangle} &= \frac{E_2-E_1}{2V} + \sqrt{\frac{(E_2-E_1)^2}{4V^2} + 1} \\
\frac{\left\langle 2|\psi_-\right\rangle}{\left\langle 1|\psi_-\right\rangle} &= \frac{E_2-E_1}{2V} - \sqrt{\frac{(E_2-E_1)^2}{4V^2} + 1}
\end{aligned}
\tag{1-2.3}
$$

1-3

$$
\begin{aligned}
\left\langle \psi_+\right| H \left|\psi_-\right\rangle = E_+\left\langle \psi_+|\psi_-\right\rangle &= E_-\left\langle \psi_+|\psi_-\right\rangle \\
0 &= (E_+ - E_-)\left\langle \psi_+|\psi_-\right\rangle
\end{aligned}
\tag{1-3.1}
$$

いま、固有値は異なるので $\left\langle \psi_+|\psi_-\right\rangle = 0$ がいえ、固有状態が直交しているのがわかる。

1-4

設問 2 で得られた結果に $E_1 = E_2 - \mathcal{E}\lambda$ を入れると

$$
E_\pm(\lambda) = E_2 - \frac{\mathcal{E}\lambda}{2} \pm \sqrt{\frac{\mathcal{E}^2\lambda^2}{4} + V^2}
\tag{1-4.1}
$$

これより

$$
E_+(\lambda) - E_-(\lambda) = 2\sqrt{\frac{\mathcal{E}^2\lambda^2}{4} + V^2} \geq 2\sqrt{V^2} = 2V
\tag{1-4.2}
$$

1-5

(i)

シュレディンガー方程式に $\ket{\psi_\pm^{(t/T)}}$ の完全系をいれて整理していく。

$$
\begin{aligned}
i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\ket{\psi(t)} &= H\ket{\psi(t)} \\
i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Big(\ket{\psi_+^{(t/T)}}\braket{\psi_+^{(t/T)}|\psi(t)}+\ket{\psi_-^{(t/T)}}\braket{\psi_-^{(t/T)}|\psi(t)}\Big) &= \ket{\psi_+^{(t/T)}}\braket{\psi_+^{(t/T)}|H|\psi_+^{(t/T)}}\braket{\psi_+^{(t/T)}|\psi(t)} \\
&\quad+\ket{\psi_+^{(t/T)}}\braket{\psi_+^{(t/T)}|H|\psi_-^{(t/T)}}\braket{\psi_-^{(t/T)}|\psi(t)} \\
&\quad+\ket{\psi_+^{(t/T)}}\braket{\psi_+^{(t/T)}|H|\psi_+^{(t/T)}}\braket{\psi_+^{(t/T)}|\psi(t)} \\
&\quad+\ket{\psi_-^{(t/T)}}\braket{\psi_-^{(t/T)}|H|\psi_-^{(t/T)}}\braket{\psi_-^{(t/T)}|\psi(t)} \\
i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Big(c_+(t)\ket{\psi_+^{(t/T)}}+c_-(t)\ket{\psi_-^{(t/T)}}\Big) &= E_+(t/T)c_+(t)\ket{\psi_+^{(t/T)}}+E_-(t/T)c_-(t)\ket{\psi_-^{(t/T)}}
\end{aligned}
\tag{1-5.1}
$$

また、$\ket{\psi_+^{(\lambda)}}$ と $\ket{\psi_-^{(\lambda)}}$ が直交していることから

$$
\ket{\psi_-^{(t/T)}} = -\sin(\theta(\lambda))\ket{1}+\cos(\theta(\lambda))\ket{2}
\tag{1-5.2}
$$

のように書ける。$\ket{\psi_\pm^{(t/T)}}$ の基底で書いた時間発展の式を $\ket{1},\ket{2}$ の基底で書き直すと

$$
\begin{aligned}
&i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Big[\Big\{c_+(t)\cos(\theta(t/T))-c_-(t)\sin(\theta(t/T))\Big\}\ket{1}+\Big\{c_+(t)\sin(\theta(t/T))+c_-(t)\cos(\theta(t/T))\Big\}\ket{2}\Big] \\
&=\Big\{E_+(t/T)c_+(t)\cos(\theta(t/T))-E_-(t/T)c_-(t)\sin(\theta(t/T))\Big\}\ket{1} \\
&\quad+\Big\{E_+(t/T)c_+(t)\sin(\theta(t/T))+E_-(t/T)c_-(t)\cos(\theta(t/T))\Big\}\ket{2}
\end{aligned}
\tag{1-5.3}
$$

これより各基底の成分を見ると

$$
\begin{aligned}
\Big(i\hbar\frac{\partial}{\partial t}-E_+(t/T)\Big)c_+(t)\cos(\theta(t/T))-\Big(i\hbar\frac{\partial}{\partial t}-E_-(t/T)\Big)c_-(t)\sin(\theta(t/T))&=0 \\
\Big(i\hbar\frac{\partial}{\partial t}-E_+(t/T)\Big)c_+(t)\sin(\theta(t/T))+\Big(i\hbar\frac{\partial}{\partial t}-E_-(t/T)\Big)c_-(t)\cos(\theta(t/T))&=0
\end{aligned}
\tag{1-5.4}
$$

(ii)

一般の関数 $f(t)$ に対し、

$$
i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Big[f(t)e^{-\frac{i}{\hbar}\int_{-T}^{t}dt'E_\pm(t'/T)}\Big]=e^{-\frac{i}{\hbar}\int_{-T}^{t}dt'E_\pm(t'/T)}\Big[-i\hbar\frac{\partial}{\partial t}+E_\pm(t/T)\Big]f(t)
\tag{1-5.5}
$$

となるので、$f(t)=\tilde{c}_\pm(t)\cos(\theta(t/T)),\tilde{c}_\pm(t)\sin(\theta(t/T))$ として前問で得られた時間発展の式に入れると、

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t}\Big[\tilde{c}_+(t)\cos(\theta(t/T))-\tilde{c}_-(t)\sin(\theta(t/T))\Big]&=0 \\
\frac{\partial}{\partial t}\Big[\tilde{c}_+(t)\sin(\theta(t/T))+\tilde{c}_-(t)\cos(\theta(t/T))\Big]&=0
\end{aligned}
\tag{1-5.6}
$$

1-6

外部パラメータ λ は磁場で、ゼーマン分裂によるエネルギー準位のシフトを表していると見える。ホッピング V によって二準位は結合性軌道と反結合性軌道になり、磁場を加えてもと 2 準位の上下を入れ替えたとしても、結合性軌道と反結合性軌道は設問 4 により交わることはなく、反結合性軌道はいつまでたっても反結合性軌道の対称性をもつといった感じか。

感想

その場で notation を把握しないといけないのが面倒な問題。

設問 6 でいろいろ与えられたものを使った説明は全く思いつかなかった。ナイーブに設問 5 の結果を使うとうまくいかない。設問 5 で得られた時間発展の式と与えられた初期条件より

$$\begin{aligned}\tilde{c}_+(t)\cos(\theta(t/T)) - \tilde{c}_-(t)\sin(\theta(t/T)) &= \tilde{c}_+(-T)\cos(\theta(-1)) - \tilde{c}_-(-T)\sin(\theta(-1)) = 1 \\ \tilde{c}_+(t)\sin(\theta(t/T)) + \tilde{c}_-(t)\cos(\theta(t/T)) &= \tilde{c}_+(-T)\sin(\theta(-1)) + \tilde{c}_-(-T)\cos(\theta(-1)) = 0\end{aligned}$$

これより

$$\tilde{c}_+(t) = \cos(\theta(t/T)), \quad \tilde{c}_-(t) = -\sin(\theta(t/T))$$

なので、$t = T$ では

$$\tilde{c}_+(T) = 0, \quad \tilde{c}_-(T) = 1$$

となって意図しない解が出てしまっている。