量子力学 III

1. 時間に依存しない摂動論（複習）
2. 時間に依存する摂動論
   摂動による遷移
3. 衝突の理論
4. 多体論入門
   多粒子系の記述
5. 半古典論（WKB法）

1. 摂動論　(直感的な導出)

$H = H_0 + \lambda V$

$\boxed{(H_0 + \lambda V)\psi_n = E_n \psi_n}$ を解きたい。

ただし, $H_0 \phi_n = E_n^{(0)} \phi_n$ は解けているとする。

もし $\lambda V = 0$ なら $H = H_0$

$\psi_n = \phi_n, \quad E_n = E_n^{(0)}$

$\lambda V \approx 0$ なら $\psi_n \approx \phi_n$

↓ $(H_0 + \lambda V)\phi_n \approx E_n \phi_n$

↓ $E_n \approx \langle \phi_n | H_0 + \lambda V | \phi_n \rangle$

$$\approx E_n^{(0)} + \underbrace{\lambda \langle \phi_n | V | \phi_n \rangle}_{= \Delta E_n}$$

$$|\psi_n\rangle = N\left\{ |\phi_n\rangle + \sum_{k\neq n} \underbrace{C_{nk}}_{\lambda C_{nk}^{(1)} + \lambda C_{nk}^{(2)} + \cdots} |\phi_k\rangle \right\}$$

1. 摂動論

$$H = H_0 + \lambda V$$

$$\boxed{(H_0 + \lambda V)\psi_n = E_n \psi_n}$$ を解きたい。

suppose $\quad H_0 \phi_n = E_n^{(0)} \phi_n$

$$\psi_n = \psi_n^{(0)} + \lambda \psi_n^{(1)} + \lambda^2 \psi_n^{(2)} + \cdots$$
$$E_n = E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \cdots$$

↓

$$(H_0 + \lambda V)(\psi_n^{(0)} + \lambda \psi_n^{(1)} + \lambda^2 \psi_n^{(2)} + \cdots) = (E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \cdots)(\psi_n^{(0)} + \lambda \psi_n^{(1)} + \lambda^2 \psi_n^{(2)} + \cdots)$$

$O(\lambda^0)$:

$$H_0 \psi_n^{(0)} = E_n^{(0)} \psi_n^{(0)} \longrightarrow \psi_n^{(0)} = \phi_n$$

$O(\lambda^1)$:

$$H_0 \psi_n^{(1)} + V \psi_n^{(0)} = E_n^{(0)} \psi_n^{(1)} + E_n^{(1)} \psi_n^{(0)}$$

(note) $\quad \psi_n^{(1)} = \sum_{m\neq n} C_{nm}^{(1)} \phi_m$

↓

$$\sum_m C_{nm}^{(1)} E_m^{(0)} \phi_m + V\phi_n = E_n^{(0)} \sum_m C_{nm}^{(1)} \phi_m + E_n^{(1)} \phi_n$$

$$\langle \phi_n | \phi_m \rangle = \delta_{n,m}$$

$\downarrow$

$\langle \phi_n | \rightarrow$

$$\cancel{C_{nn}^{(1)} E_n^{(0)}} + \langle \phi_n | V | \phi_n \rangle = \cancel{E_n^{(0)} C_{nn}^{(1)}} + E_n^{(1)}$$

$\downarrow$

$$\boxed{E_n^{(1)} = \langle \phi_n | V | \phi_n \rangle}$$

)

$\langle \phi_\ell | \rightarrow \qquad (\ell \neq n)$

$$C_{n\ell}^{(1)} E_\ell^{(0)} + \langle \phi_\ell | V | \phi_n \rangle = E_n^{(0)} C_{n\ell}^{(1)}$$

$\downarrow$

$$\boxed{C_{n\ell}^{(1)} = \frac{\langle \phi_\ell | V | \phi_n \rangle}{E_n^{(0)} - E_\ell^{(0)}}}$$

)

$O(\lambda^2)$:

$$V\psi_n^{(1)} + H_0\psi_n^{(2)} = E_n^{(0)}\psi_n^{(2)} + E_n^{(1)}\psi_n^{(1)} + E_n^{(2)}\psi_n^{(0)}$$

$\langle \phi_n | \rightarrow$

$$\boxed{E_n^{(2)} = \langle \phi_n | V | \psi_n^{(1)} \rangle = \sum_{l\neq n} \frac{\langle \phi_n | V | \phi_l \rangle \langle \phi_l | V | \phi_n \rangle}{E_n^{(0)} - E_l^{(0)}}}$$

Remarks:

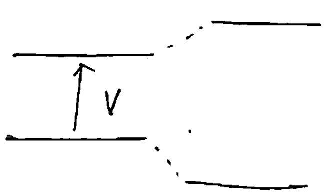
1) for $n=0$, $E_n^{(0)} - E_l^{(0)} < 0$ for all $l \neq n$

$\Downarrow$

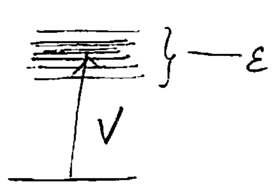
$E_n^{(2)} < 0$

2) if $\langle \phi_n | V | \phi_l \rangle \sim$ similar, the larger $E_n^{(2)}$ is for the smaller $E_n^{(0)} - E_l^{(0)}$

3) 2準位系



4) closure approximation

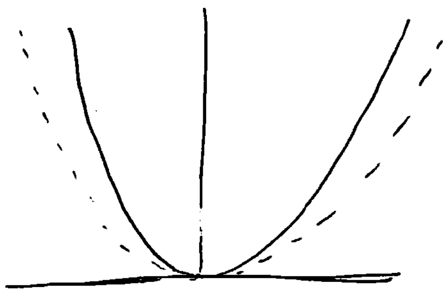


$$E_n^{(2)} \sim \sum_{l\neq n} \frac{\langle \phi_n | V | \phi_l \rangle \langle \phi_l | V | \phi_n \rangle}{E_n^{(0)} - \varepsilon}$$

$$\sim \frac{\langle \phi_n | V^2 | \phi_n \rangle}{E_n^{(0)} - \varepsilon}$$

例題

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 + \beta x^4$$



$$\phi_n(x) = N H_n\left(\frac{x}{b}\right) e^{-\frac{x^2}{2b^2}}$$

$$b^2 = \frac{\hbar}{m\omega}$$

$$\Delta E_n = \langle n | \beta x^4 | n \rangle$$

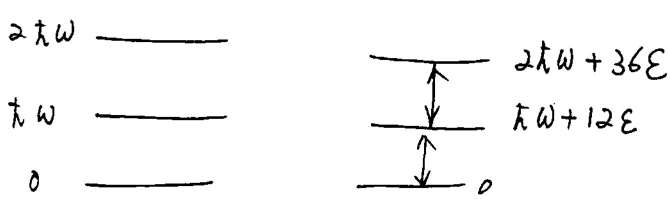
$$x = \alpha_0 (a + a^\dagger) \qquad \alpha_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}$$

$$a|n\rangle = \sqrt{n}\,|n-1\rangle$$
$$a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}\,|n+1\rangle$$

$$x|n\rangle = \alpha_0\left(\sqrt{n}\,|n-1\rangle + \sqrt{n+1}\,|n+1\rangle\right)$$
$$x^2|n\rangle = \alpha_0^2\left(\sqrt{n}\sqrt{n-1}\,|n-2\rangle + n|n\rangle + (n+1)|n\rangle + \sqrt{n+1}\sqrt{n+2}\,|n+2\rangle\right)$$

$$\Rightarrow \langle n|x^4|n\rangle = \alpha_0^4\{n(n-1) + (2n+1)^2 + (n+1)(n+2)\}$$
$$= \alpha_0^4(n^2 - n + 4n^2 + 4n + 1 + n^2 + 3n + 2)$$
$$= \alpha_0^4(6n^2 + 6n + 3)$$

$$\Rightarrow \quad E_n \sim n\hbar\omega + \beta\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^2(6n^2 + 6n + 3)$$



非調和性

○縮退がある場合

$|\phi_n^{(1)}\rangle, \cdots, |\phi_n^{(N_n)}\rangle$ が縮退

$$|\psi_n\rangle = \eta\left\{ \sum_i \alpha_i |\phi_n^{(i)}\rangle + \lambda \sum_{k\neq n} C_{nk}^{(1)} |\phi_k\rangle + \cdots \right\}$$ とおく。

↓ $(H_0 + V)|\psi_n\rangle$

$$= \eta\left\{ \sum_i \alpha_i E_n^{(0)} |\phi_n^{(i)}\rangle + \lambda \sum_{k\neq n} C_{nk}^{(1)} E_k^{(0)} |\phi_k\rangle + \cdots \right.$$
$$\left. + \sum_i \alpha_i V |\phi_n^{(i)}\rangle + \lambda \sum_{k\neq n} C_{nk}^{(1)} V |\phi_k\rangle + \cdots \right\}$$

$$= (E_n^{(0)} + E_n^{(1)} + \cdots) |\psi_n\rangle$$

$\langle \phi_n^{(j)} | \longrightarrow$

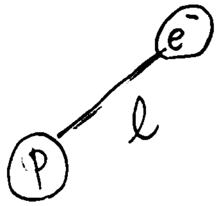
1次のオーダー：

$$\boxed{\sum_i \alpha_i \langle \phi_n^{(j)} | V | \phi_n^{(i)} \rangle = E_n^{(1)} \alpha_j}$$

→ $\{ |\phi_n^{(1)}\rangle, \cdots, |\phi_n^{(N_n)}\rangle \}$ で張られる空間で H を対角化。

→ 縮退がとける。

摂動によって縮退が解ける簡単な例



水素原子の $l=2$ 状態

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - \frac{Ze^2}{r}$$

$$\phi_{nlm}(\vec{r}) = R_{nl}(r)\, Y_{lm}(\hat{r})$$

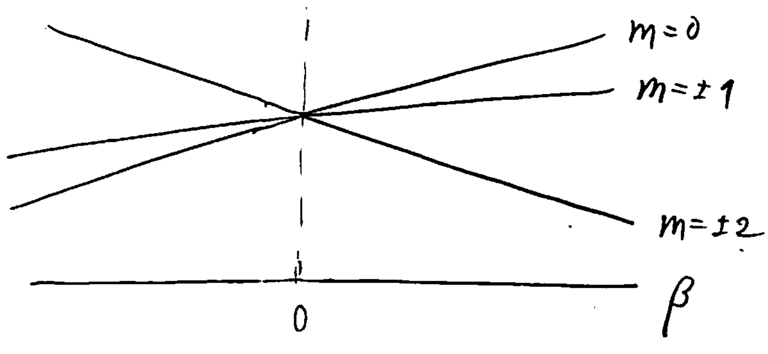
$m=-l,\cdots\cdots,l$ が縮退

$V=\beta Y_{20}(\hat{r})$ が加わると

$$\langle Y_{lm}|Y_{20}|Y_{lm'}\rangle = \int d\hat{r}\; Y_{lm}^{*}(\hat{r})\, Y_{20}(\hat{r})\, Y_{lm'}(\hat{r})$$

$$= C_{lm}\,\delta_{m,m'}$$

$$\langle Y_{20}|Y_{20}|Y_{20}\rangle = \frac{2}{7}\sqrt{\frac{5}{4\pi}}$$
$$\langle Y_{2\pm1}|Y_{20}|Y_{2\pm1}\rangle = \frac{1}{7}\sqrt{\frac{5}{4\pi}}$$
$$\langle Y_{2\pm2}|Y_{20}|Y_{2\pm2}\rangle = -\frac{2}{7}\sqrt{\frac{5}{4\pi}}$$



2. 時間に依存する摂動論

2.1. 時間に依存する結合チャンネル方程式

時間を含む Schrödinger eq.: $(i\hbar\partial_t - H_0)\psi(t)=0$

suppose $\quad H_0\phi_n = \varepsilon_n\phi_n$

and $\quad$ at $\quad t=0 \quad \psi(t)=\phi_n$

$\downarrow$

$$\psi(t) = e^{-i\varepsilon_n t/\hbar}\phi_n \qquad (定常解)$$

問題：（時間に依存する）ポテンシャル $V(t)$ が加わった時，系はどのように時間発展するか？

$$(i\hbar\partial_t - H_0 - V(t))\psi(t)=0 \qquad \text{with} \quad \psi(t=0)=\phi_n.$$

を解く。

$$\psi(t)=\sum_m c_m(t)\,e^{-i\varepsilon_m t/\hbar}\phi_m \qquad と展開$$

$\downarrow \qquad c_m(t=0)=\delta_{n,m}$

$$i\hbar\dot{\psi} = i\hbar\sum_m \dot{c}_m e^{-i\varepsilon_m t/\hbar}\phi_m + i\hbar\sum_m c_m\left(\frac{-i\varepsilon_m}{\hbar}\right)e^{-i\varepsilon_m t/\hbar}\phi_m$$

$$= i\hbar\sum_m \dot{c}_m e^{-i\varepsilon_m t/\hbar}\phi_m + \sum_m \varepsilon_m c_m e^{-i\varepsilon_m t/\hbar}\phi_m$$

$$H_0\psi = \sum_m c_m e^{-i\varepsilon_m t/\hbar}H_0\phi_m$$

$$= \sum_m \varepsilon_m c_m e^{-i\varepsilon_m t/\hbar}\phi_m$$

$$\left(i\hbar \sum_m \dot{c}_m e^{-i\varepsilon_m t/\hbar}\phi_m - V\sum_m c_m e^{-i\varepsilon_m t/\hbar}\phi_m\right)=0$$

$\langle\phi_k| \longrightarrow$

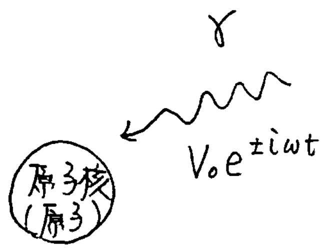
$$i\hbar\, \dot{c}_k\, e^{-i\varepsilon_k t/\hbar} - \sum_m c_m \langle\phi_k|V|\phi_m\rangle e^{-i\varepsilon_m t/\hbar} = 0$$

$$\boxed{i\hbar\, \dot{c}_k = \sum_m c_m\, e^{i(\varepsilon_k-\varepsilon_m)t/\hbar}\langle\phi_k|V|\phi_m\rangle}$$

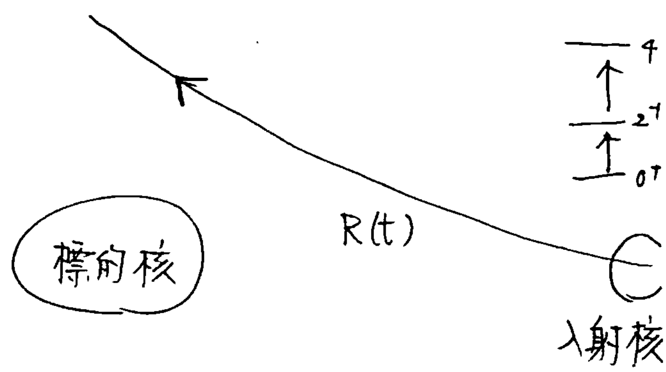
（時間に依存する結合チャンネル方程式）

$c_k(0)=\delta_{k,n}$

例）



基底状態



$$V(t) \propto Z_pZ_Te^2\frac{R_T^2}{R(t)^3}\cdot x$$

$$H_0 = \frac{p^2}{2m}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2$$

ニュートリノ振動

$\nu_e \leftrightarrow \nu_\mu$

$$i\hbar\,\partial_t\begin{pmatrix}c_e\\ c_\mu\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}V_{ee} & V_{e\mu}\\ V_{\mu e} & V_{\mu\mu}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}c_e\\ c_\mu\end{pmatrix}$$

$$i\hbar\, \dot{c}_k(t) = \sum_m c_m(t)\, e^{i\varepsilon_{km} t/\hbar}\, V_{km}(t)$$

$\downarrow$

$$c_k(t) = \delta_{k,n} + \frac{1}{i\hbar}\int_0^t dt' \sum_m \underbrace{c_m(t')}_{} e^{i\varepsilon_{km} t'/\hbar}\, V_{km}(t')$$

$$\| $$

$$\delta_{m,n} + \frac{1}{i\hbar}\int_0^{t'} dt'' \sum_{m'} c_{m'}(t'')\, e^{i\varepsilon_{mm'} t''/\hbar} \times V_{mm'}(t'')$$

$$= \delta_{k,n} + \frac{1}{i\hbar}\int_0^t dt'\, e^{i\varepsilon_{kn} t'/\hbar}\, V_{kn}(t')$$

$$+ \left(\frac{1}{i\hbar}\right)^2 \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' \sum_{m,m'} e^{i\varepsilon_{km} t'/\hbar}\, e^{i\varepsilon_{mm'} t''/\hbar}\, V_{km}(t')\, V_{mm'}(t'') \times c_{m'}(t'')$$