Department of Physics
Tohoku University
Sendai, Japan.

量子力学Ⅲ（2013年度）

1. 時間に依存する摂動論
   外から刺激を与えると系はどのように応答するか？

2. 散乱理論
3. 半古典論（WKB法）
4. 経路積分の方法

参考書

◦ガシオロヴィッツ「量子力学」（丸善）

1. 時間に依存する摂動論

1.1. 時間に依存する結合方程式

$$H = H_0 + V(t)$$

時間に依存
(小さな外場)

H_0 の固有値, 固有関数はわかっている
とする:

$$H_0 \phi_n = E_n \phi_n$$

$t=0$ で系が ϕ_n の状態にあったとする
$\psi(t=0) = \phi_n$

→ 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?

時間に依存するシュレーディンガー方程式

$$\begin{cases} i\hbar \dfrac{\partial}{\partial t} \psi(t) = (H_0 + V(t))\,\psi(t) \\ \psi(t=0) = \phi_n \end{cases}$$

を解く。
(近似的に)

Department of Physics
Tohoku University
Sendai

$$\psi(t) = \sum_k c_k(t) e^{-iE_k t/\hbar} \phi_k$$ と展開

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

$\downarrow$

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \sum_k (i\hbar \dot{c}_k + E_k c_k) e^{-iE_k t/\hbar} \phi_k$$

$\cup$

$$H_0 \psi = \sum_k E_k c_k e^{-iE_k t/\hbar} \phi_k$$

$$H_0 \phi_k = E_k \phi_k$$

$\Downarrow$

$$i\hbar \sum_k \dot{c}_k e^{-iE_k t/\hbar} \phi_k = V(t) \sum_k c_k e^{-iE_k t/\hbar} \phi_k$$

$\langle \phi_m | \rightarrow$

$\cup$

$$i\hbar \dot{c}_m e^{-iE_m t/\hbar} = \sum_k c_k e^{-iE_k t/\hbar} \langle \phi_m | V | \phi_k \rangle$$

$\Downarrow$

$$\boxed{i\hbar \dot{c}_m = \sum_k \underbrace{e^{iE_m t/\hbar} \langle \phi_m | V | \phi_k \rangle e^{-iE_k t/\hbar}}_{\equiv \tilde{V}_{mk}(t)} c_k(t)}$$

(note) 相互作用表示

$$i\hbar\,\partial_t|\psi(t)\rangle = (H_0 + V(t))|\psi(t)\rangle$$

$$|\tilde{\psi}(t)\rangle = e^{iH_0 t/\hbar}|\psi(t)\rangle$$ という変換を定義
(相互作用表示)

↓

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\tilde{\psi}(t)\rangle = \cancel{-H_0 e^{iH_0 t/\hbar}}|\psi(t)\rangle + e^{iH_0 t/\hbar}\cdot \underbrace{i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle}_{=(\cancel{H_0+}V)|\psi(t)\rangle}$$

$$= e^{iH_0 t/\hbar} V|\psi(t)\rangle$$

$$= \underbrace{e^{iH_0 t/\hbar} V e^{-iH_0 t/\hbar}}_{\equiv \tilde{V}} \cdot \underbrace{e^{iH_0 t/\hbar}|\psi(t)\rangle}_{=|\tilde{\psi}(t)\rangle}$$

(note) $$\langle\phi_m|\tilde{V}|\phi_k\rangle = e^{iE_m t/\hbar}\langle\phi_m|V|\phi_k\rangle \times e^{-iE_k t/\hbar}$$

$$= \tilde{V}_{mk}.$$

1.2 時間に依存する摂動論

$$\begin{cases} i\hbar\,\dot{C}_m(t) = \sum_k C_k(t)\,\tilde{V}_{mk}(t) \\ C_m(t=0) = \delta_{m,n} \end{cases}$$

$\downarrow$

$$C_m(t) = \delta_{m,n} + \frac{1}{i\hbar}\int_0^t dt' \sum_k C_k(t')\,\tilde{V}_{mk}(t')$$

ここに右辺全体を代入する

$$= \delta_{m,n} + \frac{1}{i\hbar}\int_0^t dt' \sum_k \tilde{V}_{mk}(t')$$
$$\times \left\{ \delta_{k,n} + \frac{1}{i\hbar}\int_0^{t'} dt'' \sum_l C_l(t'')\,\tilde{V}_{kl}(t'') \right\}$$

ここにさらに右辺
全体を代入する

$$= \delta_{m,n} + \frac{1}{i\hbar}\int_0^t dt'\,\tilde{V}_{mn}(t')$$
$$+ \left(\frac{1}{i\hbar}\right)^2 \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' \sum_k \tilde{V}_{mk}(t')\,\tilde{V}_{kn}(t'')$$
$$+ \cdots$$

$$\equiv C_m^{(0)}(t) + C_m^{(1)}(t) + C_m^{(2)}(t) + \cdots$$

$$C_m^{(0)}(t) = \delta_{m,n}$$

$$C_m^{(1)}(t) = \frac{1}{i\hbar}\int_0^t dt' \; \tilde{V}_{mn}(t') \qquad ：1次の摂動$$

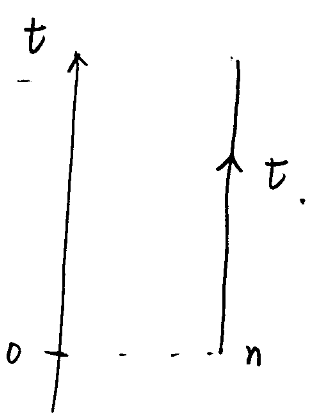
$$C_m^{(2)}(t) = \left(\frac{1}{i\hbar}\right)^2 \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' \sum_k \tilde{V}_{mk}(t')\,\tilde{V}_{kn}(t'')$$

：2次の摂動

◎ グラフ的理解

（準備）　$V(t) = 0$ のとき

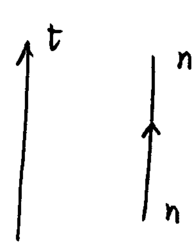
$$\psi(t) = \underbrace{e^{-iE_n t/\hbar}}_{\text{時間発展}} \phi_n$$



$$\psi(t) = \sum_m \boxed{e^{-iE_m t/\hbar}\, C_m(t)}\, \phi_m$$

・0次の摂動

$$e^{-iE_m t/\hbar} C_m^{(0)}(t) = e^{-iE_n t/\hbar}\, \delta_{m,n}$$

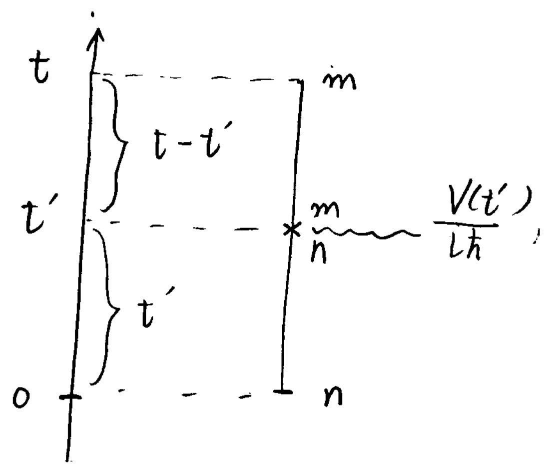


・1次の摂動

$$e^{-iE_m t/\hbar}\, c_m^{(1)}(t) = e^{-iE_m t/\hbar}\int_0^t dt'\; e^{iE_m t'/\hbar}\cdot\frac{V_{mn}(t')}{i\hbar}$$

$$\times\, e^{-iE_n t'/\hbar}$$

$$= \int_0^t dt'\; e^{-iE_m(t-t')/\hbar}\cdot\frac{V_{mn}(t')}{i\hbar}\, e^{-iE_n t'/\hbar}$$



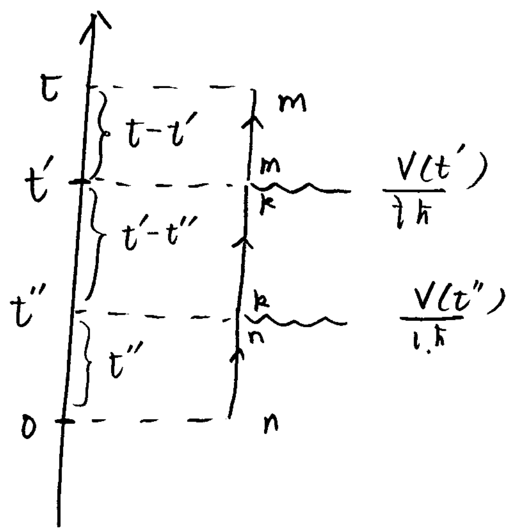
※ t'は $0 \le t' \le t$ のどこでもいいので積分.

・2次の摂動

$$e^{-iE_m t/\hbar}\, c_m^{(2)}(t)$$

$$= \int_0^t dt' \; e^{-iE_m(t-t')/\hbar} \sum_k \frac{V_{mk}(t')}{i\hbar} \int_0^{t'} dt'' \; e^{-iE_k(t'-t'')/\hbar}$$

$$\times \frac{V_{kn}(t'')}{i\hbar} e^{-iE_n t''/\hbar}$$



以下高次の項も同様.

Department of Physics
Tohoku University
Sendai, Japan

◎ 摂動による遷移

$$\psi(t) = \sum_k C_k(t)\, e^{-iE_kt/\hbar}\, \phi_k$$

$\leftrightarrow$ $t>0$ において波動関数は様々な状態の重ね合わせ

$\longleftrightarrow$ 摂動を加えた後で系の状態を観測すれば最初の状態 n と異なる状態 k に系が存在する確率がある。
「摂動により $n \to k$ へ遷移した」

遷移確率 $$P_k(t) = |\langle \phi_k | \psi(t) \rangle|^2$$
$$= |C_k(t)\, e^{-iE_kt/\hbar}|^2$$
$$= |C_k(t)|^2$$

Department of Physics
Tohoku University
Sendai Japan

$k \neq n$ の場合

$$C_k(t) = C_k^{(1)}(t) + C_k^{(2)}(t) + \cdots$$

$$\downarrow$$

$$P_k(t) \sim |C_k^{(1)}(t)|^2$$

$$= \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_0^t dt' \, \tilde{V}_{kn}(t') \right|^2$$

$k = n$ の場合

$$P_n(t) = 1 - \sum_{k \neq n} P_k(t)$$

（※ この式は 2次の摂動まで考慮することによって導出可 ）