

2014年度夏学期 量子力学 II ノート

浜口幸一

平成26年7月15日

目次

§ 0 はじめに (4/8~)	1
§ 0.1 自己紹介	1
§ 0.2 ウェブページ / 予定 / 演習問題の配布について / 成績	1
§ 0.3 おさらい	2
§ 0.4 可換な演算子の固有状態	5
§ 0.5 3次元空間の量子力学	5
§ 1 角運動量	7
§ 1.1 軌道角運動量	7
§ 1.1.1 定義	7
§ 1.1.2 全角運動量	8
§ 1.1.3 交換関係 (~4/8)	8
§ 1.1.4 球対称ポテンシャルのとき、ハミルトニアンと可換 (4/15~)	9
§ 1.2 角運動量演算子の固有状態	10
§ 1.3 軌道角運動量の固有状態を座標表示すると 球面調和関数 (~4/15、4/22~)	14
§ 1.4 角運動量の合成と Clebsch-Gordon 係数 (~4/22)	17
§ 1.5 スピン角運動量 (5/1~)	22
§ 1.6 $s = 1/2$ のとき、パウリ行列	23
§ 2 3次元球対称ポテンシャル内の粒子	24
§ 2.1 この章でやること	24
§ 2.2 球対称ポテンシャルのとき、ハミルトニアンと角運動量は 可換	25
§ 2.3 動径方向 (~5/1)	26
§ 2.4 水素原子 (5/13~)	30
§ 2.4.1 $R(r)$ の微分方程式を解く。	30
§ 2.4.2 エネルギーの量子化	32
§ 2.4.3 水素原子まとめ	34
§ 2.4.4 さらに...	35
§ 2.4.5 重心運動の分離	36

§ 3 スピンと磁気モーメント	37
§ 3.1 一様磁場中のループ電流	37
§ 3.2 角運動量と磁気モーメント (~5/13)	37
§ 3.3 LS 結合 (5/20 ~)	39
§ 3.4 これまでの話を全部合わせると …	40
§ 3.5 一様磁場中のスピン	40
§ 4 様々な近似法	42
§ 4.1 摂動論 (定常状態)	42
§ 4.1.1 やりたいこと	42
§ 4.1.2 縮退なしの状態 (~5/20、5/27 ~)	43
§ 4.1.3 縮退ありの状態 (5/27、6/3)	51
§ 4.1.A ハミルトニアン \iff 行列 (6/3)	52
§ 4.1.4 Zeeman 効果とか (6/10、6/17)	60
§ 4.2 摂動論 (時間発展) (6/17)	69
§ 4.2.1 摂動なし	69
§ 4.2.2 摂動あり	70
§ 4.2.3 遷移確率を求めてみると …	74
§ 4.3 準古典近似 (WKB 近似) (7/1 ~)	76
§ 4.3.1 WKB 近似	76
§ 4.3.2 具体例：トンネル効果	80
§ 4.3.3 接続公式 (7/8 ~)	83
§ 5 対称性と保存則	88
§ 5.1 運動量 \mathbf{p} は並進、角運動量 \mathbf{L} は回転の生成子 (~7/8)	88
§ 5.1.1 \vec{p} は並進	88
§ 5.1.2 \vec{L} は回転	89
§ 5.2 ユニタリー演算子とエルミート演算子 (7/15 ~)	90
§ 5.3 対称性と保存則	91
§ 5.4 保存量	92
§ 5.5 対称性	93
§ 5.5.1 ユニタリー演算子と対称性	93
§ 5.5.2 連続対称性の生成子と保存量	95
§ 6 オマケ	96

§ 0 はじめに (4/8~)

§ 0.1 自己紹介

浜口幸一 (時々「濱口」も使います)

- ▶ 専門：素粒子論 + 初期宇宙も
- ▶ 916号室 (いつでもどうぞ)
- ▶ hamaguchi@phys.s.u-tokyo.ac.jp (いつでもどうぞ)

§ 0.2 ウェブページ / 予定 / 演習問題の配布について / 成績

ウェブページ

(浜口幸一のページを検索 → 講義のページ → 量子力学2のページ)

- ▶ レポートのアナウンス、
- ▶ 進行状況、など

予定

4/8, 4/15, 4/22,

5/1(木), 5/13, 5/20, 5/27

6/3, 6/10, 6/17, [6/24 は休講]

7/1, 7/8, 7/15, 7/22 (期末試験)

9/2 (補講・成績と関係ナシ、オマケ)

13コマ + 期末試験 + オマケの補講

演習問題の配布

講義の終わりに「物理学演習 III (量子力学)」の問題を配布します。

履修していない学生も、挑戦しましょう。

時々、演習で示した (示す) 結果を講義で用いることがあります。

§ 0.3 おさらい

いくつかおさらい (リラックスして聞いて下さい。)

(i) 古典論から量子論は導けない



(ii) Shrödinger eq.

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = \hat{H} \psi(x, t) \quad (1)$$

… § 2 では3次元に拡張して $\psi(\vec{x}, t) = \psi(x, y, z, t)$ とする。

(iii) エネルギー固有状態 = 定常状態

あるハミルトニアン \hat{H} (例えば $\hat{H} = \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)$) に対して、固有値と固有状態が求まったとする。

$$\hat{H} \varphi(x) = E \varphi(x) \quad (2)$$

↑ ↙ ↘
ハミルトニアンの固有値 固有関数
= エネルギー固有値

すると

$$\psi(x, t) = \exp\left(\frac{-iEt}{\hbar}\right) \varphi(x)$$

は Shrödinger eq.(1) の解であり、確率分布

$$|\psi(x, t)|^2 = |\varphi(x)|^2$$

が時間 t によらない (定常状態)。この講義ではしばらくはコレを考える。

(iv) ブラケット

▶ 状態ベクトル $|\alpha\rangle$

▶ 内積 $\langle\alpha|\beta\rangle \in \mathbb{C}$

- $\| |\alpha\rangle \|^2 = \langle\alpha|\alpha\rangle \geq 0 \quad (\langle\alpha|\alpha\rangle = 0 \iff |\alpha\rangle = 0)$

- $\langle\alpha|p\beta + q\gamma\rangle = p\langle\alpha|\beta\rangle + q\langle\alpha|\gamma\rangle \quad \text{for } p, q \in \mathbb{C}$

- $\langle\alpha|\beta\rangle = \langle\beta|\alpha\rangle^*$

▶ 演算子 $\hat{A} \cdots \hat{A}|\alpha\rangle$ も状態ベクトル

$$\left(\begin{array}{l} |\alpha\rangle \text{ が } \hat{A} \text{ の固有ベクトル : } \hat{A}|\alpha\rangle = a|\alpha\rangle \\ \text{(状態)} \end{array} \right) \quad \begin{array}{l} \swarrow \\ \text{固有値} \end{array}$$

▶ 共役演算子 $\hat{A}^\dagger : \langle\alpha|\hat{A}^\dagger|\beta\rangle = \langle\beta|\hat{A}|\alpha\rangle^*$

▶ 自己共役演算子 (エルミート共役演算子) $\hat{A}^\dagger = \hat{A} \cdots$ 固有値が実

(v) 座標表示とブラ・ケット表示 この2つを行ったり来たり出来るか？

	座標表示 具体的 x とその微分 で書かれている	(関係式)	ブラケット表示 抽象的 なんか演算子とブラケット で書かれている
状態	波動関数 $\varphi_n(x)$	$\varphi_n(x) = \langle x n\rangle$ $\hat{x} x\rangle = x x\rangle$	ケット $ n\rangle$
位置演算子 運動量演算子	$\hat{x} = x$ $\hat{p} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$	$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \langle x n\rangle = \langle x \hat{p} n\rangle$ (★1) (コレ、導ける?)	\hat{x} は \hat{x} \hat{p} は \hat{p} (仮定は $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$ だけ。)
エネルギー固有状態	$\hat{H}\varphi_n(x) = E_n\varphi_n(x)$ (★2)		$\hat{H} n\rangle = E_n n\rangle$ (★3)

例えば最後の段は、(★3) からスタートすると

$$\begin{aligned}
 \left(\frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x}) \right) |n\rangle &= E_n |n\rangle \\
 \langle x| \left(\frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x}) \right) |n\rangle &= \langle x|E_n|n\rangle \\
 &= \frac{1}{2m} \langle x|\hat{p}^2|n\rangle + \langle x|V(\hat{x})|n\rangle = E_n \langle x|n\rangle \\
 (\star 1) &= \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \right)^2 \langle x|n\rangle + V(x) \langle x|n\rangle \\
 &= \left(\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right) \varphi_n(x) = E_n \varphi_n(x) \quad (3)
 \end{aligned}$$

と(★2)にたどり着ける。

この辺が不安な人は今日の演習問題をしっかり復習！。

例えば調和振動子 $V(x) = (1/2)m\omega^2 x^2$ では

- ▶ $\varphi_n(x)$ … なんかエルミート多項式で書かれている
- ▶ $|n\rangle$ … なんか生成演算子で書かれてる

って習ったよね?(習った?)

上の関係式を用いてこれらを行き来出来るか??

§ 0.4 可換な演算子の固有状態

以下が成立する。

\hat{A}, \hat{B} がエルミート演算子で、 $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$ とする。このとき、 \hat{A}, \hat{B} の共通の固有ベクトルのセット

$$|n, m, k\rangle : \begin{cases} \hat{A} |n, m, k\rangle = a_n |n, m, k\rangle \\ \hat{B} |n, m, k\rangle = b_m |n, m, k\rangle \end{cases}$$

があって、任意の \hat{A} の固有ベクトルは $|n, m, k\rangle$ の線形結合で表せる。
(ラベル k はあってもなくても良い。)

証明

→ **第一回レポート**

どう使う??

- ▶ 角運動量演算子、 $[\hat{L}^2, \hat{L}_i] = 0$ (\hat{L} は角運動量) → § 1.1
- ▶ 球対称ポテンシャル $V = V(r)$ のとき、 $[\hat{H}, \hat{L}] = 0$ → § 2.2

§ 0.5 3次元空間の量子力学

§ 1、§ 2 では主に 3次元空間の量子力学を扱う。

$$\hat{\mathbf{r}} = (\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}) = (\hat{x}_1, \hat{x}_2, \hat{x}_3)$$

$$\hat{\mathbf{p}} = (\hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z) = (\hat{p}_1, \hat{p}_2, \hat{p}_3)$$

交換関係は

$$[\hat{x}_j, \hat{p}_k] = i\hbar \delta_{jk}$$

2014年度夏学期 量子力学 II (浜口) 第1回レポート: 4/8(火) 出題

- 締切: 2014年5/9(金) 17:00
- 提出先: 物理教務(理学部1号館208号室) 入口横 レポートボックス
- レポートには科目名、氏名、学籍番号、学年を明記し提出する事。
- 成績は、2回のレポートと期末試験(7/22(火) 予定)の結果を総合して評価する。
レポートは以下の講義のウェブページでも公開している。
<http://www-hep.phys.s.u-tokyo.ac.jp/~hama/lectures/lecture.html>

【問題1】以下のことを示したい。

\hat{A}, \hat{B} がエルミート演算子で、 $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$ とする。このとき、 \hat{A}, \hat{B} の共通の固有ベクトルのセット

$$|n, m\rangle : \begin{cases} \hat{A}|n, m\rangle = a_n |n, m\rangle \\ \hat{B}|n, m\rangle = b_m |n, m\rangle \end{cases}$$

があって、任意の \hat{A} の固有ベクトルは $|n, m\rangle$ の線形結合で表せる。— (*)

まず \hat{A} の固有値に縮退がない場合、以下のように示せる。

(i) 任意の \hat{A} の固有ベクトル $|n\rangle$ を考える。つまり $\hat{A}|n\rangle = a_n |n\rangle$ 。

(ii) $\hat{B}|n\rangle$ というベクトルを考えると、

$$\hat{A}(\hat{B}|n\rangle) = \hat{B}\hat{A}|n\rangle = \hat{B}a_n |n\rangle = a_n (\hat{B}|n\rangle)$$

よって $\hat{B}|n\rangle$ も \hat{A} の固有ベクトルであり、その固有値は a_n である。

(iii) \hat{A} の固有値には縮退がないと仮定したので、 $\hat{B}|n\rangle \propto |n\rangle$ 。
適当な比例係数を置いて $\hat{B}|n\rangle = b_n |n\rangle$ 。

(iv) したがって \hat{A} の任意の固有ベクトル $|n\rangle$ は \hat{B} の固有ベクトルにもなっている。
よって (*) が示せた。

問題: \hat{A} の固有値に縮退がある場合に (*) を示せ。

【問題2】

【2-1】量子力学に関する問題を一つ書け。

【2-2】[2-1]の問題に答えよ。

以上

§ 1 角運動量

§ 1.1 軌道角運動量

§ 1.1.1 定義

▶ 古典

$$\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p} \quad L_i = \epsilon_{ijk} r_j p_k$$

▶ 量子

$$\hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}} \quad \hat{L}_i = \epsilon_{ijk} \hat{r}_j \hat{p}_k = \begin{cases} \hat{L}_x = \hat{y} \hat{p}_z - \hat{z} \hat{p}_y \\ \hat{L}_y = \hat{z} \hat{p}_x - \hat{x} \hat{p}_z \\ \hat{L}_z = \hat{x} \hat{p}_y - \hat{y} \hat{p}_x \end{cases}$$

Comments

$$1. \epsilon_{jkl} = \begin{cases} +1 & (jkl = 123, 231, 312) \\ -1 & (jkl = 132, 321, 213) \\ 0 & (\text{otherwise}) \end{cases}$$

2. $\epsilon_{ijk} r_j p_k = \sum_{j,k=1}^3 \epsilon_{ijk} r_j p_k$ (繰り返しの添字は和を取る。)

3. **エルミート演算子である。** ($\hat{L}_x^\dagger = (\hat{y} \hat{p}_z - \hat{z} \hat{p}_y)^\dagger = \hat{p}_z \hat{y} - \hat{p}_y \hat{z} = \hat{L}_x$)

▶ 座標表示すると

$$\hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{r}} \times (-i\hbar) \nabla = \begin{cases} \hat{L}_x = -i\hbar \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) \\ \hat{L}_y = -i\hbar \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right) \\ \hat{L}_z = -i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) \end{cases}$$

Comments

1. 極座標表示も出来る (→ 演習 No.1。 $(x, y, z) \rightarrow (r, \theta, \phi)$)

2. 以下の議論はほとんど座標表示を用いなくても
(交換関係 $[\hat{r}_j, \hat{p}_k] = i\hbar \delta_{jk}$ さえ成立すれば) 成立する。

§ 1.1.2 全角運動量

$$\hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2$$

極座標表示で表すと

$$\hat{L}^2 = (-\hbar^2) \left(\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{1}{\tan \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right)$$

(→ 演習 No.1)

§ 1.1.3 交換関係 (~ 4/8)

$$[\hat{L}_j, \hat{L}_k] = i\hbar \epsilon_{jkl} \hat{L}_l \quad \cdots \hat{L}_x \text{ と } \hat{L}_y \text{ は交換しない !!}$$

$$[\hat{L}^2, \hat{L}_j] = 0$$

(check) $[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = [\hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y, \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z]$

$$= [\hat{y}\hat{p}_z, \hat{z}\hat{p}_x] - [\hat{y}\hat{p}_z, \hat{x}\hat{p}_z] - [\hat{z}\hat{p}_y, \hat{z}\hat{p}_x] + [\hat{z}\hat{p}_y, \hat{x}\hat{p}_z]$$

$$= -i\hbar \hat{y}\hat{p}_x - 0 - 0 + i\hbar \hat{p}_y \hat{x}$$

$$= i\hbar \hat{L}_z$$

$$[\hat{L}^2, \hat{L}_j] = \hat{L}_k [\hat{L}_k, \hat{L}_j] + [\hat{L}_k, \hat{L}_j] \hat{L}_k$$

$$= \hat{L}_k \cdot i\hbar \epsilon_{kjm} \hat{L}_m + i\hbar \epsilon_{kjm} \hat{L}_m \cdot \hat{L}_k$$

$$= 0$$

2014. 4. 8 ここまで

2014. 4. 15

前回のあらすじ

§ 0.4 $[A, B] = 0$ のとき …

§ 1 角運動量

§ 1.1 軌道角運動量

§ 1.1.1 $L = r \times p$

§ 1.1.2 L^2

§ 1.1.3 $[L_i, L_j]$

今日ここから

§ 1.1.4 球対称ポテンシャルのとき、ハミルトニアンと可換 (4/15~)

$$[\hat{L}_j, \hat{H}] = 0 \quad (\text{球対称ポテンシャル})$$

$$[\hat{L}^2, \hat{H}] = 0 \quad (\text{球対称ポテンシャル})$$

§ 2.2 であらためてやる。(→ 証明は演習 No.1。)

§ 1.2 角運動量演算子の固有状態

ここでは

$$[\hat{L}_j, \hat{L}_k] = i\hbar\epsilon_{jkl}\hat{L}_l \quad \text{--- (★)}$$

だけを出発点に、 \hat{L} の固有状態を考える。(ちょい長い。step 0 ~ step 7)

step 0 実は、交換関係(★)をみたく演算子は $\hat{L} = \hat{r} \times \hat{p}$ 以外にもある。
(例えばスピン演算子 → § 1.5)

交換関係(★)をみたく演算子を一般に \hat{J} と書いておく。出発点は

$$\begin{aligned} \hat{J}_a \quad (a = 1, 2, 3) \quad & \text{エルミート演算子} \\ [\hat{J}_a, \hat{J}_b] = i\hbar\epsilon_{abc}\hat{J}_c \quad & \text{--- (1)} \end{aligned}$$

これだけを仮定する。

step 1 $\hat{J}_a = \hbar\hat{j}_a$ と書くと、(1)は

$$[\hat{j}_a, \hat{j}_b] = i\epsilon_{abc}\hat{j}_c \quad \text{--- (1)'}$$

となる。

$$\begin{aligned} \hat{j}_\pm &= \hat{j}_1 \pm i\hat{j}_2 \\ \hat{j}^2 &= \hat{j}_1^2 + \hat{j}_2^2 + \hat{j}_3^2 \end{aligned}$$

と定義すると、以下が示せる(複合同順)

$$[\hat{j}^2, \hat{j}_3] = [\hat{j}^2, \hat{j}_\pm] = 0 \quad \text{--- (2)}$$

$$[\hat{j}_3, \hat{j}_\pm] = \pm\hat{j}_\pm \quad \text{--- (3)}$$

$$\begin{aligned} \hat{j}^2 &= \hat{j}_3^2 + \frac{1}{2}(\hat{j}_+\hat{j}_- + \hat{j}_-\hat{j}_+) \\ &= \hat{j}_3(\hat{j}_3 + 1) + \hat{j}_-\hat{j}_+ \\ &= \hat{j}_3(\hat{j}_3 - 1) + \hat{j}_+\hat{j}_- \quad \text{--- (4)} \end{aligned}$$

計算はカンタン。各自やること

step 2 (2) より $[\hat{j}^2, \hat{j}_3] = 0$ なので、§ 0.4 の結果より、
 \hat{j}^2 と \hat{j}_3 の任意の固有ベクトルは \hat{j}^2 と \hat{j}_3 に共通の固有ベクトルのセット

$$|\lambda, \mu, k\rangle : \begin{cases} \hat{j}^2 |\lambda, \mu, k\rangle = \lambda |\lambda, \mu, k\rangle \\ \hat{j}_3 |\lambda, \mu, k\rangle = \mu |\lambda, \mu, k\rangle \end{cases}$$

の線形結合で書ける。 k は他の自由度 (例えばエネルギー)。以下省略。
 また、規格直交化されているとして

$$\langle \lambda', \mu' | \lambda, \mu \rangle = \delta_{\lambda\lambda'} \delta_{\mu\mu'}$$

step 3 (4) より、任意の $|\lambda, \mu\rangle$ に対して

$$\langle \lambda, \mu | \hat{j}^2 | \lambda, \mu \rangle = \langle \lambda, \mu | \left(\hat{j}_3^2 + \frac{1}{2} \hat{j}_+ \hat{j}_- + \frac{1}{2} \hat{j}_- \hat{j}_+ \right) | \lambda, \mu \rangle$$

$$\therefore \lambda = \mu^2 + \frac{1}{2} \|\hat{j}_- | \lambda, \mu \rangle\|^2 + \frac{1}{2} \|\hat{j}_+ | \lambda, \mu \rangle\|^2 \geq \mu^2$$

よって

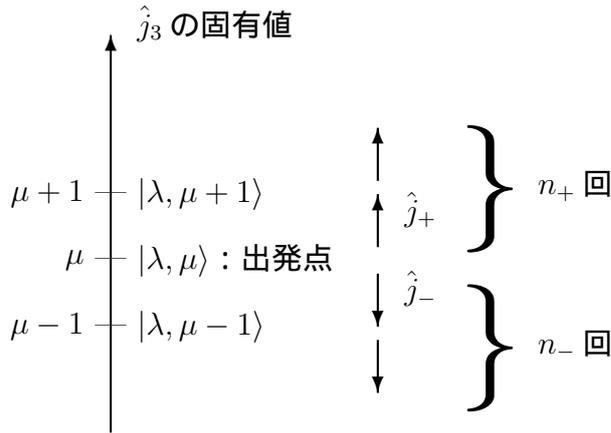
$$\begin{cases} \lambda \geq 0 \\ -\sqrt{\lambda} \leq \mu \leq \sqrt{\lambda} \end{cases}$$

step 4 任意の $|\lambda, \mu\rangle$ に対して、 $\hat{j}_\pm | \lambda, \mu \rangle$ を考えると

$$\begin{cases} \hat{j}^2 (\hat{j}_\pm | \lambda, \mu \rangle) = \hat{j}_\pm \hat{j}^2 | \lambda, \mu \rangle \quad (\leftarrow (2)) \\ \quad \quad \quad = \lambda (\hat{j}_\pm | \lambda, \mu \rangle) \\ \hat{j}_3 (\hat{j}_\pm | \lambda, \mu \rangle) = \hat{j}_\pm (\hat{j}_3 \pm 1) | \lambda, \mu \rangle \quad (\leftarrow (3)) \\ \quad \quad \quad = (\mu \pm 1) (\hat{j}_\pm | \lambda, \mu \rangle) \end{cases}$$

より、 $\hat{j}_\pm | \lambda, \mu \rangle$ は \hat{j}^2 と \hat{j}_3 の同時固有ベクトルで、

$$\hat{j}_\pm | \lambda, \mu \rangle \propto | \lambda, \mu \pm 1 \rangle$$



step 5 step 3 より、 \hat{j}_3 の固有値は上限、下限がある。それを

$$\begin{cases} \mu_{\max} = \mu + n_+ & (\leq \sqrt{\lambda}) \\ \mu_{\min} = \mu - n_- & (\geq -\sqrt{\lambda}) \end{cases}$$

とおくと

$$\hat{j}_+ |\lambda, \mu_{\max}\rangle = 0 \text{ --- (5)}$$

$$\hat{j}_- |\lambda, \mu_{\min}\rangle = 0 \text{ --- (6)}$$

(4)(5) より

$$\langle \lambda, \mu_{\max} | \hat{j}^2 | \lambda, \mu_{\max} \rangle = \langle \lambda, \mu_{\max} | \left(\hat{j}_3(\hat{j}_3 + 1) + \hat{j}_- \overset{\rightarrow 0}{\hat{j}_+} \right) | \lambda, \mu_{\max} \rangle$$

$$\therefore \lambda = \mu_{\max}(\mu_{\max} + 1) \text{ --- (7)}$$

同様に (4)(6) より

$$\lambda = \mu_{\min}(\mu_{\min} - 1) \text{ --- (8)}$$

(7) - (8) より

$$(\mu_{\max} + \mu_{\min}) \underbrace{(\mu_{\max} - \mu_{\min} + 1)}_{>0} = 0$$

$$\therefore \mu_{\max} = -\mu_{\min}$$

一方

$$\mu_{\max} = \mu_{\min} + \underbrace{n_+ + n_-}_{\equiv n : \text{整数} (\geq 0)}$$

だったので、結局

$$\begin{cases} \mu_{\max} = \frac{n}{2} = -\mu_{\min} \\ \lambda = \frac{n}{2} \left(\frac{n}{2} + 1 \right) \end{cases}$$

step 6 まとめて、

$$[\hat{J}_a, \hat{J}_b] = i\hbar\epsilon_{abc}\hat{J}_c \quad \text{--- (1)}$$

をみたくエルミート演算子 \hat{J}_a に対して、 \hat{J}^2 と \hat{J}_3 の同時固有ベクトルのセットがとれて、

$$\begin{aligned}\hat{J}^2 |j, m\rangle &= j(j+1)\hbar^2 |j, m\rangle \\ \hat{J}_3 |j, m\rangle &= m\hbar |j, m\rangle\end{aligned}$$

ただし

$$\begin{aligned}j &= \frac{n}{2} = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots \\ m &= \underbrace{-j, -j+1, \dots, j-1, j}_{(2j+1)\text{個}}\end{aligned}$$

j は整数と半整数の値を取れる。

step 7 規格化

$$\langle j, m | j', m' \rangle = \delta_{jj'} \delta_{mm'}$$

一方 step 4 より

$$\hat{J}_{\pm} |j, m\rangle \propto |j, m \pm 1\rangle$$

比例係数は??

$$\begin{aligned}\|\hat{J}_{\pm} |j, m\rangle\|^2 &= \langle j, m | \hat{J}_{\mp} \hat{J}_{\pm} |j, m\rangle \\ &= \langle j, m | (\hat{J}^2 - \hat{J}_3(\hat{J}_3 \pm 1)) |j, m\rangle \quad (\leftarrow (4)) \\ &= (j(j+1) - m(m \pm 1)) \underbrace{\langle j, m | j, m \rangle}_1\end{aligned}$$

$$\therefore \hat{J}_{\pm} |j, m\rangle = \sqrt{j(j+1) - m(m \pm 1)} \hbar |j, m \pm 1\rangle$$

(phase factor は定義に吸収)

§ 1.3 軌道角運動量の固有状態を座標表示すると 球面調和関数 (~ 4/15、 4/22 ~)

▶ § 1.2 では一般の \hat{J} でやった。($[\hat{J}, \hat{J}] = i\hbar\epsilon\hat{J}$ のみ仮定)
→ $\hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}}$ に戻る。

▶ § 1.2 の結果より \hat{L}^2 と \hat{L}_3 の固有ベクトルは

$$\begin{aligned}\hat{L}^2 |\ell, m\rangle &= \ell(\ell+1)\hbar |\ell, m\rangle & \ell = 0, 1, 2 \cdots \text{ or } \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \cdots \\ \hat{L}_3 |\ell, m\rangle &= m\hbar |\ell, m\rangle & m = -\ell, -\ell+1, \cdots, \ell-1, \ell\end{aligned}\quad (1)$$

▶ $|\ell, m\rangle$ を座標表示すると??

$|\mathbf{r}\rangle = |x_1, x_2, x_3\rangle$ を $\hat{\mathbf{r}} = (\hat{x}_1, \hat{x}_2, \hat{x}_3)$ の固有ケットとする。
($\hat{x}_i |\mathbf{r}\rangle = x_i |\mathbf{r}\rangle$ for $i = 1, 2, 3$.) 以下を定義する。

$$\langle \mathbf{r} | \ell, m \rangle \equiv \varphi_{\ell, m}(\mathbf{r})$$

(1) の左から $\langle \mathbf{r} |$ をかけると

$$\langle \mathbf{r} | \hat{L}^2 | \ell, m \rangle = \ell(\ell+1)\hbar^2 \langle \mathbf{r} | \ell, m \rangle \quad (2)$$

$$\langle \mathbf{r} | \hat{L}_3 | \ell, m \rangle = m\hbar \langle \mathbf{r} | \ell, m \rangle \quad (3)$$

(3) の左辺は

$$\begin{aligned}\langle \mathbf{r} | \hat{L}_3 | \ell, m \rangle &= \langle \mathbf{r} | \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x | \ell, m \rangle \\ &= \left(x \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \right) \langle \mathbf{r} | \ell, m \rangle \quad \left(\because \langle \mathbf{r} | \hat{p}_j | \alpha \rangle = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_j} \langle \mathbf{r} | \alpha \rangle \right) \\ &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi} \langle \mathbf{r} | \ell, m \rangle \quad \left(\text{球座標表示} : \begin{cases} x = r \sin \theta \cos \phi \\ y = r \sin \theta \sin \phi \\ z = r \cos \theta \end{cases} \right)\end{aligned}\quad (4)$$

同様に (2) の左辺は

$$\langle \mathbf{r} | \hat{L}^2 | \ell, m \rangle = (-\hbar^2) \underbrace{\left(\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{1}{\tan \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right)}_{\equiv \hat{\Omega}(\theta, \phi)} \langle \mathbf{r} | \ell, m \rangle \quad (5)$$

(2) (3) (4) (5) より $\varphi_{\ell,m}(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} | \ell, m \rangle$ は

$$\hat{\Omega}(\theta, \phi)\varphi_{\ell,m}(\mathbf{r}) = -\ell(\ell+1)\varphi_{\ell,m}(\mathbf{r}) \quad (6)$$

$$\frac{\partial}{\partial \phi}\varphi_{\ell,m}(\mathbf{r}) = im\varphi_{\ell,m}(\mathbf{r}) \quad (7)$$

これ… 見覚えがある (はず)!!

(6) (7) の解は

$$\begin{aligned} \varphi_{\ell,m}(\mathbf{r}) &= \varphi_{\ell,m}(r, \theta, \phi) \\ &\propto Y_{\ell,m}(\theta, \phi) \end{aligned}$$

▶ 球面調和関数 $Y_{\ell,m}(\theta, \phi)$

(… 参考: 物理数学 2 by 立川さん + 演習 No.2)

2014. 4. 15 ここまで

2014. 4. 22

前回のあらすじ

§ 1.2 $[J, J] = i\hbar J$ のときの J^2, J_3 の固有状態は $|j, m\rangle$

§ 1.3 $J = L = r \times p$ のとき、 $\langle \mathbf{r} | \ell, m \rangle \propto Y_{\ell,m}(\mathbf{r})$: 球面調和関数

今日ここから

$$Y_{\ell,m}(\theta, \phi) \equiv N_{\ell,m} P_{\ell}^m(\cos \theta) e^{im\phi} \quad \begin{cases} \ell = 0, 1, 2, \dots \\ m = -\ell, -\ell+1, \dots, \ell-1, \ell \end{cases}$$

$$N_{\ell,m} = (-1)^m \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi} \frac{(\ell-m)!}{(\ell+m)!}}$$

$$P_{\ell}^m(x) = \frac{1}{2^{\ell} \ell!} (1-x^2)^{m/2} \frac{d^{\ell+m}}{dx^{\ell+m}} (x^2-1)^{\ell} : \text{ルジャンドル陪関数}$$

(注: 文献によって少し違う定義もある。($|m|$ を用いたものなど。))

(図をウェブページに載せたので見てみて下さい。)

性質 \hat{L}^2 の固有関数: $\hat{\Omega}(\theta, \phi)Y_{\ell, m}(\theta, \phi) = -\ell(\ell + 1)Y_{\ell, m}(\theta, \phi)$

\hat{L}_3 の固有関数: $\frac{\partial}{\partial \phi}Y_{\ell, m}(\theta, \phi) = imY_{\ell, m}(\theta, \phi)$

正規直交性: $\int_{-1}^1 d\cos\theta \int_0^{2\pi} d\phi Y_{\ell, m}(\theta, \phi)Y_{\ell', m'}^*(\theta, \phi) = \delta_{\ell\ell'}\delta_{mm'}$

完全性: $\sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m=-\infty}^{\infty} Y_{\ell, m}(\theta, \phi)Y_{\ell, m}^*(\theta', \phi') = \delta(\cos\theta - \cos\theta')\delta(\phi - \phi')$

具体形 $Y_{0,0} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \quad Y_{1,0} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta \quad Y_{1,\pm 1} = \pm\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta e^{\pm i\phi} \dots$

▶ 話を元に戻すと ...

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{r} | \ell, m \rangle &= \varphi_{\ell, m}(\mathbf{r}) \\ &= \varphi_{\ell, m}(r, \theta, \phi) \propto Y_{\ell, m}(\theta, \phi) \end{aligned}$$

Comments

1. $Y_{\ell, m}$ の ℓ, m は整数

§ 1.2 の一般の \hat{J} では $|j, m\rangle$ の j は $\frac{1}{2}, \frac{3}{2} \dots$ でもよかったはず。
どこが一般の場合と違う？

→ $\hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}}$ の場合には、固有関数の一価性

$$\varphi(r, \theta, \phi + 2\pi) = \varphi(r, \theta, \phi)$$

より ϕ 方向の依存性が $e^{im\phi}$ ($m = \text{整数}$) と決まる。

→ \hat{j}_3 の固有値 $m = \text{整数}$ 。(→ \hat{j}^2 の固有値も。)

正確には、状態ベクトルが $|x, y, z\rangle$ で完全に指定されているという仮定に基づいている。スピンなどの自由度がある場合は別。

2. r 依存性は??

$$\varphi_{\ell, m}(r, \theta, \phi) = R(r)Y_{\ell, m}(\theta, \phi)$$

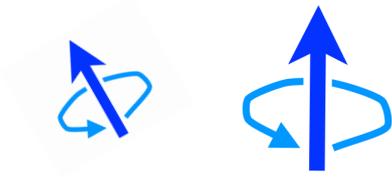
→ § 2.3 で $R(r)$ を議論する。

§ 1.4 角運動量の合成と Clebsch-Gordon 係数 (~ 4/22)

▶ 2 粒子系

$$\begin{cases} \text{粒子 1 : 角運動量 } \vec{L}_1 = \vec{r}_1 \times \vec{p}_1 \\ \text{粒子 2 : 角運動量 } \vec{L}_2 = \vec{r}_2 \times \vec{p}_2 \end{cases}$$

→ 「系全体の角運動量」は $\vec{L} = \vec{L}_1 + \vec{L}_2$



量子論では \hat{L}_1 や \hat{L}_2 の固有値がとびとびだった。

$\hat{L} = \hat{L}_1 + \hat{L}_2$ の固有値は??... 例えば

$$\begin{cases} \hat{L}_1^2 \text{ の固有値 : } l_1(l_1 + 1)\hbar^2 \\ \hat{L}_2^2 \text{ の固有値 : } l_2(l_2 + 1)\hbar^2 \end{cases}$$

という状態の、 \hat{L}^2 の固有値はどーなる??

▶ § 1.2 のときのように、一般の \hat{J} で考えよう。以下を仮定する。

$$\begin{cases} [\hat{J}_{1a}, \hat{J}_{1b}] = i\epsilon_{abc}\hat{J}_{1c} & (\hat{J}_{1a} = \hbar\hat{j}_{1a}) \\ [\hat{J}_{2a}, \hat{J}_{2b}] = i\epsilon_{abc}\hat{J}_{2c} \\ [\hat{J}_{1a}, \hat{J}_{2b}] = 0 & \text{(2つの角運動量は可換)} \end{cases} \quad \text{--- (1)}$$

このとき、 $\hat{j}_1^2, \hat{j}_2^2, \hat{j}_{1z}, \hat{j}_{2z}$ の4つが全て可換なので、

§ 0.4 と § 1.2 の議論より、同時固有ベクトルのセット $|j_1, j_2; m_1, m_2\rangle$

$$\begin{cases} \hat{j}_1^2 |j_1, j_2; m_1, m_2\rangle = j_1(j_1 + 1) |j_1, j_2; m_1, m_2\rangle \\ \hat{j}_2^2 |j_1, j_2; m_1, m_2\rangle = j_2(j_2 + 1) |j_1, j_2; m_1, m_2\rangle \\ \hat{j}_{1z} |j_1, j_2; m_1, m_2\rangle = m_1 |j_1, j_2; m_1, m_2\rangle \\ \hat{j}_{2z} |j_1, j_2; m_1, m_2\rangle = m_2 |j_1, j_2; m_1, m_2\rangle \end{cases} \quad \text{--- (2)}$$

が取れる。

▶ 合成系の角運動量

$$\hat{J}_a = \hat{j}_{1a} + \hat{j}_{2a}$$

$$\rightarrow (1) \text{ より } [\hat{J}_a, \hat{J}_b] = i\epsilon_{abc}\hat{J}_c$$

このとき

$$[\hat{J}_z, \hat{J}^2] = 0 \quad (\hat{J}^2 = \hat{J}_1^2 + \hat{J}_2^2 + \hat{J}_3^2)$$

なので \hat{J}_z と \hat{J}^2 の同時固有ベクトルがとれる。

▶ 他に可換なのは??

→ 実は $\hat{J}_z, \hat{J}^2, \hat{j}_1^2, \hat{j}_2^2$ の4つも全て可換。(1)より示せる。) によって

$$\begin{cases} \hat{J}^2 |j_1, j_2; J, M\rangle = J(J+1) |j_1, j_2; J, M\rangle \\ \hat{J}_z |j_1, j_2; J, M\rangle = M |j_1, j_2; J, M\rangle \\ \hat{j}_1^2 |j_1, j_2; J, M\rangle = j_1(j_1+1) |j_1, j_2; J, M\rangle \\ \hat{j}_2^2 |j_1, j_2; J, M\rangle = j_2(j_2+1) |j_1, j_2; J, M\rangle \end{cases} \quad \text{--- (3)}$$

なる同時固有ベクトル $|j_1, j_2; J, M\rangle$ もとれる。

▶ (2) の $|j_1, j_2; m_1, m_2\rangle$ と (3) の $|j_1, j_2; J, M\rangle$ の関係は??

角運動量の合成

$$|j_1, j_2; J, M\rangle = \sum_{m_1=-j_1}^{j_1} \sum_{m_2=-j_2}^{j_2} \underbrace{\langle j_1, j_2; m_1, m_2 | j_1, j_2; J, M \rangle}_{\text{Clebsch-Gordan (CG) 係数}} |j_1, j_2; m_1, m_2\rangle$$

▶ CG 係数の求め方の例 ($j_1 = \frac{1}{2}, j_2 = \frac{1}{2}$ の場合。)

$$j_1, j_2 \text{ を省略すると } |J, M\rangle = \sum_{m_1, m_2 = \pm 1/2} \underbrace{\langle m_1, m_2 | J, M \rangle}_{\text{CG 係数}} |m_1, m_2\rangle$$

step 1 最大の m_1, m_2 を考える。

$$\begin{aligned} m_1 = j_1, m_2 = j_2 & \quad \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \\ \hat{J}_z = \hat{j}_{1z} + \hat{j}_{2z} & : \hat{J}_z \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle = 1 \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \quad (M = 1) \\ \hat{J}^2 = \hat{J}_z(\hat{J}_z + 1) + \hat{J}_- \underbrace{\hat{J}_+}_{\hat{j}_+ + \hat{j}_-} & : \hat{J}^2 \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle = 1(1+1) \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \quad (J = 1) \\ & \therefore \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle = |1, 1\rangle \quad \text{--- (1)} \end{aligned}$$

step 2 $\hat{J}_- = \hat{j}_{1-} + \hat{j}_{2-}$ を作用。(§ 1.2 の step 7 $\rightarrow \sqrt{j(j+1) - m(m \pm 1)}$)

$$|1, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\left| -\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle + \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \right) \quad \text{--- (2)}$$

$$|1, -1\rangle = \left| -\frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \quad \text{--- (3)}$$

step 3 (2) と直交するベクトル $|\alpha\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle - \left| -\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \right)$ は $\hat{J}^2 |\alpha\rangle = 0, \hat{J}_z |\alpha\rangle = 0$ をみたす。よって $|\alpha\rangle = |0, 0\rangle$ --- (4)

step 4 (1) ~ (4) より CG 係数は

$$\begin{cases} \langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2} | 1, 1 \rangle = 1 \\ \langle \pm \frac{1}{2}, \mp \frac{1}{2} | 1, 0 \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \langle \pm \frac{1}{2}, \mp \frac{1}{2} | 0, 0 \rangle = \pm \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \langle -\frac{1}{2}, -\frac{1}{2} | 1, -1 \rangle = 1 \end{cases}$$

▶ 一般の CG 係数 → **プリント**

- $M = m_1 + m_2$ かつ $|j_1 - j_2| \leq J \leq j_1 + j_2$ のときのみ値を持つ
- $\hat{J}_\pm = \hat{j}_{1\pm} + \hat{j}_{2\pm}$ を作用させると → 漸化式 (プリント)
- 状態ベクトルの数は

$$|j_1, j_2; m_1, m_2\rangle \quad m_1 = \underbrace{-j_1 \cdots j_1}_{(2j_1+1)}, m_2 = \underbrace{-j_2 \cdots j_2}_{(2j_2+1)}, \quad (2j_1+1)(2j_2+1) \text{ 個}$$

	$M = -J \cdots J$
$J = j_1 + j_2$	$2(j_1 + j_2) + 1$ 個
\cdots	\cdots
$J = j_1 - j_2 $	$2(j_1 - j_2) + 1$ 個
合計	$(2j_1 + 1)(2j_2 + 1)$ 個 ... 一致!

2014. 4. 22 ここまで。

5/1 ここから ...

あらすじ

§ 1.1 $L = r \times p$

§ 1.2 $|j, m\rangle$

§ 1.3 $\langle \mathbf{r} | \ell, m \rangle \propto Y_{\ell, m}(\theta, \phi)$

§ 1.4 $J_1 + J_2$ 、CG 係数

Clebsch-Gordan 係数

$$|j_1, j_2; J, M\rangle = \sum_{m_1=-j_1, m_2=-j_2}^{j_1, j_2} \langle j_1, j_2; m_1, m_2 | j_1, j_2; J, M\rangle \cdot |j_1, j_2; m_1, m_2\rangle$$

漸化式

$$\begin{aligned} & \sqrt{(J \mp 1)(J \pm M + 1)} \langle j_1, j_2; m_1, m_2 | j_1, j_2; J, M \pm 1 \rangle \\ &= \sqrt{(j_1 \pm 1)(j_1 \mp m_1 + 1)} \langle j_1, j_2; m_1 \mp 1, m_2 | j_1, j_2; J, M \rangle \\ &+ \sqrt{(j_2 \pm 1)(j_2 \mp m_2 + 1)} \langle j_1, j_2; m_1, m_2 \mp 1 | j_1, j_2; J, M \rangle \end{aligned}$$

一般式 (Racah の公式)

$$\begin{aligned} & \langle j_1, j_2; m_1, m_2 | j_1, j_2; J, M \rangle \\ &= \delta_{m_1+m_2, M} \\ &\times \left[\frac{(2J+1)(j_1+j_2-J)! (j_1-j_2+J)! (-j_1+j_2+J)!}{(j_1+j_2+J+1)!} \right]^{1/2} \\ &\times \langle j_1+m_1, j_1-m_1 | j_1, j_2; m_1, m_2 \rangle \langle j_2-m_2, j_2-m_2 | j_2, j_2; J, M \rangle^{1/2} \\ &\times \sum_{k \in \mathbb{Z}} (-1)^k k! (j_1+j_2-J-k)! (j_1-m_1-k)! (j_2+m_2-k)! (J-j_2+k)! (J-j_1+k)! (J-j_1-m_2+k)! \end{aligned}$$

例: $j_1 = any (\geq 1/2), j_2 = 1/2$

$$|j_1, \frac{1}{2}; J, M\rangle = \sum_{m_2=\pm 1/2} \langle j_1, \frac{1}{2}; M-m_2, m_2 | j_1, \frac{1}{2}; J, M\rangle \cdot |j_1, \frac{1}{2}; M-m_2, m_2\rangle$$

$J = j_1 + \frac{1}{2}$	$m_2 = 1/2$	$m_2 = -1/2$
$J = j_1 - \frac{1}{2}$	$\sqrt{\frac{j_1+M+1/2}{2j_1+1}}$	$\sqrt{\frac{j_1-M+1/2}{2j_1+1}}$
	$-\sqrt{\frac{j_1-M+1/2}{2j_1+1}}$	$\sqrt{\frac{j_1+M+1/2}{2j_1+1}}$

例: $j_1 = any (\geq 1), j_2 = 1$

$$|j_1, 1; J, M\rangle = \sum_{m_2=0, \pm 1} \langle j_1, 1; M-m_2, m_2 | j_1, 1; J, M\rangle \cdot |j_1, 1; M-m_2, m_2\rangle$$

$J = j_1 + 1$	$m_2 = 1$	$m_2 = 0$	$m_2 = -1$
$J = j_1$	$\sqrt{\frac{(j_1+M)(j_1+M+1)}{2j_1+1}}$	$\sqrt{\frac{(j_1-M+1)(j_1+M+1)}{(2j_1+1)(2j_1+2)}}$	$\sqrt{\frac{(j_1-M)(j_1-M+1)}{(2j_1+1)(2j_1+2)}}$
$J = j_1 - 1$	$-\sqrt{\frac{(j_1-M)(j_1-M+1)}{2j_1+1}}$	$-\sqrt{\frac{(j_1+M)(j_1+M+1)}{2j_1(2j_1+1)}}$	$\sqrt{\frac{(j_1-M)(j_1+M)}{2j_1(2j_1+1)}}$

訂正がある場合, <http://www-hep.phys.s.u-tokyo.ac.jp/~hama/lectures/> に掲載する。

出典: The Review of Particle Physics (Particle Data Group), <http://pdg.lbl.gov/>
(以下の表は平方根を省略しているの注意)

40. Clebsch-Gordan coefficients 1

40. CLEBSCH-GORDAN COEFFICIENTS, SPHERICAL HARMONICS, AND d FUNCTIONS

Note: A square-root sign is to be understood over every coefficient, e.g., for $-3/15$ read $-\sqrt{3/15}$.

Notation: $\begin{matrix} J & J & \dots \\ M & M & \dots \end{matrix}$ Coefficients

$Y_0^0 = \sqrt{\frac{1}{4\pi}}$

$Y_1^0 = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos\theta$

$Y_1^{\pm 1} = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin\theta e^{\pm i\phi}$

$Y_2^0 = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3\cos^2\theta - 2)$

$Y_2^{\pm 1} = \mp \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin\theta \cos\theta e^{\pm i\phi}$

$Y_2^{\pm 2} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2\theta e^{\pm 2i\phi}$

$Y_{l,m} = (-1)^m \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} Y_{l,-m}^* = \sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}} Y_{l,m} e^{-im\phi}$

$d_{m,m}^{j,j} = (-1)^m \sqrt{\frac{(j-m)! (j+m)!}{(2j)!}}$

$d_{0,0}^{j,j} = \cos\theta$

$d_{1,1}^{j,j} = \frac{1+\cos\theta}{2}$

$d_{1,0}^{j,j} = \sqrt{\frac{2}{j(j+1)}} \sin\theta$

$d_{1,-1}^{j,j} = \frac{1-\cos\theta}{2}$

$d_{2,2}^{j,j} = \frac{3}{4} (1+\cos\theta)^2$

$d_{2,1}^{j,j} = \sqrt{\frac{15}{8}} \sin\theta \cos\theta$

$d_{2,0}^{j,j} = \frac{3}{2} \cos\theta (3\cos^2\theta - 2)$

$d_{2,-1}^{j,j} = \sqrt{\frac{15}{8}} \sin\theta \cos\theta$

$d_{2,-2}^{j,j} = \frac{3}{4} (1-\cos\theta)^2$

$d_{3,3}^{j,j} = \frac{7}{8} (1+\cos\theta)^3$

$d_{3,2}^{j,j} = \sqrt{\frac{21}{4}} \sin\theta \cos^2\theta$

$d_{3,1}^{j,j} = \sqrt{\frac{105}{8}} \sin^2\theta \cos\theta$

$d_{3,0}^{j,j} = \frac{7}{8} (3\cos^3\theta - 3\cos\theta)$

$d_{3,-1}^{j,j} = \sqrt{\frac{105}{8}} \sin^2\theta \cos\theta$

$d_{3,-2}^{j,j} = \sqrt{\frac{21}{4}} \sin\theta \cos^2\theta$

$d_{3,-3}^{j,j} = \frac{7}{8} (1-\cos\theta)^3$

$d_{4,4}^{j,j} = \frac{35}{64} (1+\cos\theta)^4$

$d_{4,3}^{j,j} = \sqrt{\frac{105}{16}} \sin\theta \cos^3\theta$

$d_{4,2}^{j,j} = \sqrt{\frac{315}{64}} \sin^2\theta \cos^2\theta$

$d_{4,1}^{j,j} = \sqrt{\frac{105}{16}} \sin^3\theta \cos\theta$

$d_{4,0}^{j,j} = \frac{35}{64} (3\cos^4\theta - 6\cos^2\theta + 2)$

$d_{4,-1}^{j,j} = \sqrt{\frac{105}{16}} \sin^3\theta \cos\theta$

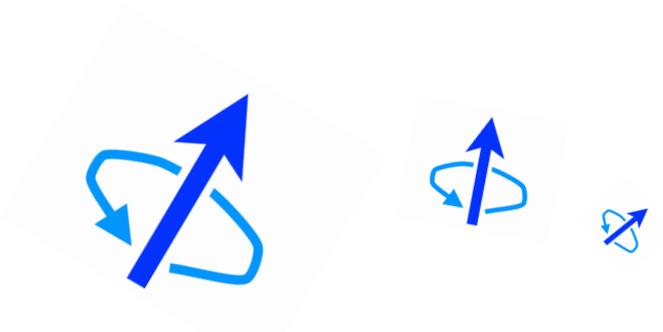
$d_{4,-2}^{j,j} = \sqrt{\frac{315}{64}} \sin^2\theta \cos^2\theta$

$d_{4,-3}^{j,j} = \sqrt{\frac{105}{16}} \sin\theta \cos^3\theta$

$d_{4,-4}^{j,j} = \frac{35}{64} (1-\cos\theta)^4$

Figure 40.1. The sign convention is that of Wigner (Group Theory, Academic Press, New York, 1959), also used by Condon and Shortley (The Theory of Atomic Spectra, Cambridge University Press, Cambridge, 1937) and by Brink and Satchler (Angular Momentum, Wiley-Interscience, New York, 1967), and Cohen (Tables of the Clebsch-Gordan Coefficients, North American Rockwell Science Center, Thousand Oaks, Calif., 1974).

§ 1.5 スピン角運動量 (5/1 ~)



- ▶ (電子などの) 粒子は、固有の角運動量 = 「スピン」を持つ。
- ▶ $\hat{L} = \hat{x} \times \hat{p}$ (=軌道角運動量と呼ぶ) とは別のもの。

\hat{J}_a	作用する状態ベクトル	j の大きさ
軌道角運動量 $\hat{J}_a = \hat{L}_a$	$ j, j_z\rangle = \ell, m\rangle \longleftrightarrow \vec{r}\rangle \sim x, y, z\rangle \sim r, \theta, \phi\rangle$ 座標空間	整数 $\ell = 0, 1, 2 \dots$
スピン角運動量 $\hat{J}_a = \hat{S}_a$	$ j, j_z\rangle = s, s_z\rangle$ 全く新しい内部自由度 古典論での対応物はない!	整数 or 整数 $+\frac{1}{2}$ $s = 0, \frac{1}{2}, 1 \dots$
合成角運動量 $\hat{J}_a = \hat{L}_a + \hat{S}_a$	$ \vec{r}; s, s_z\rangle$ 「スピン」と「空間座標」は 独立した自由度	(同上)
一般に多粒子なら $\hat{J}_a = \sum_i (\hat{L}_{ia} + \hat{S}_{ia})$	$ \vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots; s_1, s_2 \dots\rangle$	(同上)

- ▶ 粒子のスピン例

	(たぶん) 素粒子	複合粒子
$s = 0$	ヒッグス	π 中間子 ($\sim u\bar{u} - d\bar{d}$)
$s = \frac{1}{2}$	電子	陽子、中性子 (uud, udd)
$s = 1$	光子、W, Z ボゾン	^{14}N 原子核
$s = \frac{3}{2}$	(グラビティーノ?)	Δ 粒子 ($\Delta^{++} \sim uuu$ など)
$s = 2$	重力子	...

§ 1.6 $s = 1/2$ のとき、パウリ行列

$j = s = \frac{1}{2}$ のとき

$$|j, m\rangle = |1/2, m\rangle = \begin{cases} |1/2, 1/2\rangle \\ |1/2, -1/2\rangle \end{cases} = \begin{cases} |\uparrow\rangle \\ |\downarrow\rangle \end{cases} \quad \text{と書く}$$

▶ § 1.2 の一般論より

$$\begin{cases} \hat{S}_3 |\uparrow\rangle = \frac{\hbar}{2} |\uparrow\rangle \\ \hat{S}_3 |\downarrow\rangle = -\frac{\hbar}{2} |\downarrow\rangle \end{cases} \quad \text{まとめて} \quad \hat{S}_3 \begin{pmatrix} |\uparrow\rangle \\ |\downarrow\rangle \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} |\uparrow\rangle \\ |\downarrow\rangle \end{pmatrix}$$

$\hat{S}_\pm = \hat{S}_1 \pm i\hat{S}_2$ を用いて、同様に

$$\hat{S}_1 \begin{pmatrix} |\uparrow\rangle \\ |\downarrow\rangle \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} |\uparrow\rangle \\ |\downarrow\rangle \end{pmatrix} \quad \hat{S}_2 \begin{pmatrix} |\uparrow\rangle \\ |\downarrow\rangle \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & i \\ -i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} |\uparrow\rangle \\ |\downarrow\rangle \end{pmatrix}$$

$$\therefore \hat{S}_a |\alpha\rangle = \sum_{\beta=\uparrow,\downarrow} \left[\frac{\hbar}{2} \sigma_a \right]_{\beta\alpha} |\beta\rangle$$

$$\text{パウリ行列} : \sigma_a = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

▶ コメント

$$\text{行列っぽく書くと} \quad \underbrace{\hat{S}_a}_{\text{左から}} |\alpha\rangle = \sum_{\beta=\uparrow,\downarrow} |\beta\rangle \underbrace{\left[\frac{\hbar}{2} \sigma_a \right]_{\beta\alpha}}_{\text{右から}}$$

$$\left(\text{この順番で} \begin{cases} [\hat{S}_a, \hat{S}_b] = i\hbar \epsilon_{abc} \hat{S}_c \\ [\sigma_a, \sigma_b] = 2i \epsilon_{abc} \sigma_c \end{cases} \text{と consistent} \right)$$

▶ $\langle\beta|$ ではさむと

$$\langle\beta|\hat{S}_a|\alpha\rangle = \left[\frac{\hbar}{2} \sigma_a \right]_{\beta\alpha} \quad \text{スピン演算子の行列表示}$$

§ 2 3次元球対称ポテンシャル内の粒子

§ 2.1 この章でやること

目標

3次元、球対称ポテンシャル内の粒子（例えば水素原子中の電子）のエネルギーと状態を求める。具体的には

$$\text{座標表示} : \hat{H}\varphi(\mathbf{r}) = \left(\frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(|\mathbf{r}|) \right) \varphi(\mathbf{r}) = E\varphi(\mathbf{r}) \quad (1)$$

$$\Leftrightarrow^{(*)} \text{ブラケット表示} : \hat{H}|\varphi\rangle = \left(\frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + V(|\hat{\mathbf{r}}|) \right) |\varphi\rangle = E|\varphi\rangle \quad (2)$$

をみたく $E, \varphi(x)$ の組 ($\Leftrightarrow E, |\varphi\rangle$ の組) を求めたい。

(*) $\langle \mathbf{r} | \times (2) = (1)$ 。 ($\varphi(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} | \varphi\rangle$ を用いて整理。) ただし $|\mathbf{r}\rangle = |x_1, x_2, x_3\rangle$ は3つの演算子 $\hat{x}_1, \hat{x}_2, \hat{x}_3$ の同時固有状態。

$$\hat{x}_j |x_1, x_2, x_3\rangle = x_j |x_1, x_2, x_3\rangle \quad (j = 1, 2, 3)$$

先に答えを書いてしまうと

$$\text{座標表示} : \hat{H}\varphi_{n,\ell,m}(x) = E_n\varphi_{n,\ell,m}(x)$$

$$\Leftrightarrow \text{ブラケット表示} : \hat{H}|n,\ell,m\rangle = E_n|n,\ell,m\rangle$$

例えば水素原子の場合 $E_n = -13.6 \text{ eV} \times n^{-2}$ ($n = 1, 2, \dots$) となる。

エネルギーを表すラベル n 以外に、余計なラベル ℓ と m がついている。実はこいつらが § 1.2、§ 1.3 でやった角運動量のラベルになっている。

2つのアプローチ

(i) 微分方程式 (1) を $\varphi(\mathbf{r}) = \varphi(r, \theta, \phi) = R(r)Y(\theta, \phi)$ と変数分離し、 $R(r)$ と $Y(\theta, \phi)$ の微分方程式をガリガリ解く。

(ii) ハミルトニアンと可換な演算子で整理する。

ココでは (ii) でやる。(i) は自習しましょう。

両方やるのがベスト。何でも複数の角度から学ぶと立体的に見えてくる。

§ 2.2 球対称ポテンシャルのとき、ハミルトニアンと角運動量は可換

$$[\hat{L}_j, \hat{H}] = 0 \quad (1)$$

$$[\hat{L}^2, \hat{H}] = 0 \quad (2)$$

((証明) → 演習 No.1
方針: $[\hat{L}_j, \hat{r}_k]$ 、 $[\hat{L}_j, \hat{p}_k]$ を求める。 → $[\hat{L}_j, \hat{r}^2] = [\hat{L}_j, \hat{p}^2] = 0$ 。 → $[\hat{L}_j, \hat{H}] = 0$ 。)

- ▶ (1), (2), および $[\hat{L}_j, \hat{L}^2] = 0$ (§ 1.1) より、

$$[\hat{H}, \hat{L}^2] = [\hat{H}, \hat{L}_z] = [\hat{L}^2, \hat{L}_z] = 0$$

- ▶ したがって、§ 0.4 の結果より、 \hat{H} の任意の固有ベクトルは $(\hat{H}, \hat{L}^2, \hat{L}_z)$ に共通の固有ベクトルのセット $|E, \ell, m\rangle$ の線形結合で表される。

- ▶ § 1.2 より \hat{L}^2 、 \hat{L}_3 の固有値はすでに分かっている

$$\hat{H} |E, \ell, m\rangle = E |E, \ell, m\rangle \quad (3)$$

$$\hat{L}^2 |E, \ell, m\rangle = \ell(\ell + 1)\hbar^2 |E, \ell, m\rangle \quad (4)$$

$$\hat{L}_3 |E, \ell, m\rangle = m\hbar |E, \ell, m\rangle \quad (5)$$

- ▶ § 1.3 より $\langle \mathbf{r} | E, \ell, m \rangle \propto Y_{\ell, m}(\theta, \phi)$ 。

- ▶ 残るは動径方向。

§ 2.3 動径方向 (~ 5/1)

▶ 残るは動径方向。

$$\langle \mathbf{r} | E, \ell, m \rangle = R(r) Y_{\ell, m}(\theta, \phi)$$

とおくと、 $\langle \mathbf{r} | \times (3)$ より

$$\langle \mathbf{r} | \left(\frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{r}) \right) | E, \ell, m \rangle = E \underbrace{\langle \mathbf{r} | E, \ell, m \rangle}_{R(r) Y_{\ell, m}(\theta, \phi)}$$

$$= \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(r) \right) \underbrace{\langle \mathbf{r} | E, \ell, m \rangle}_{R(r) Y_{\ell, m}(\theta, \phi)}$$

ここで

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\hat{\Omega}(\theta, \phi)}{r^2} \dots (\text{物理数学 2 by 立川さん})$$

$$\hat{\Omega}(\theta, \phi) Y_{\ell, m}(\theta, \phi) = -\ell(\ell + 1) Y_{\ell, m}(\theta, \phi)$$

を代入すると、

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\ell(\ell + 1)}{r^2} \right) + V(r) \right] R(r) Y_{\ell, m}(\theta, \phi) = E R(r) Y_{\ell, m}(\theta, \phi)$$

よって

動径方向の Shrödinger eq.

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m} \left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} - \frac{\ell(\ell + 1)}{r^2} \right) + V(r) \right] R(r) = E R(r) \quad (1)$$

Comments

1. $V = V(r)$ のときは常にコレに帰着。

(例 1) 水素原子の場合

$$V(r) = -\frac{A}{r}$$

→ § 2.4 で解く。

(注: A は単位系によって $\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}$ だったり e^2 だったりするが、
値 (物理量) は $A = 2.3 \times 10^{-28} \text{kg m}^3 \text{s}^{-2} \simeq \frac{1}{137} \hbar c$.)

(例 2) 3次元調和振動子

$$V(r) = \frac{1}{2} m \omega^2 r^2 \left(= \frac{1}{2} m \omega^2 (x^2 + y^2 + z^2) \right)$$

2. 角運動量の大きさ ↔ “遠心力”

$$R(r) = \frac{\chi_\ell(r)}{r}$$

と (1) に代入、整理すると

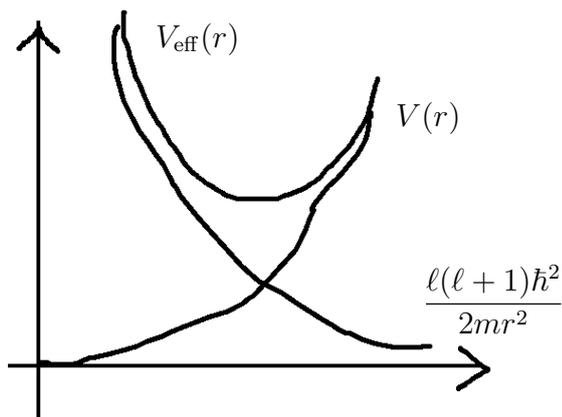
$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + \left(V(r) + \frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2mr^2} \right) \right] \chi_\ell(r) = E \chi_\ell(r) \quad (2)$$

1次元の Schrödinger eq. と同じ形 !!

ただし “ポテンシャル” は

$$V_{\text{eff}}(r) = V(r) + \frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2mr^2}$$

角運動量が大いとき (ℓ が大いとき) 粒子が原点に近づくのを妨げる。(「遠心力ポテンシャル」)



5/1 ココまで

以下、2013 & 2014 は講義せず

規格化

$$\begin{aligned} 1 &= \int d^3x |\varphi(r, \theta, \phi)|^2 \\ &= \int r^2 dr \int d\cos\theta \int d\phi |R(r)Y_{\ell,m}(\theta, \phi)|^2 = \int r^2 dr |R(r)|^2 = \int dr |\chi_{\ell}(r)|^2 \end{aligned}$$

1次元と同じ！

3. 原点近くのふるまい

$$\lim_{r \rightarrow 0} r^2 V(r) = 0$$

と仮定する。($V(r) \sim -1/r$ や $\sim r^2$ なら正しい。)

• $\ell \neq 0$ のとき

$r \rightarrow 0$ で $\chi_{\ell}(r) \sim r^s$ とすると (2) より (r^{s-2} の係数を見て)

$$-s(s-1) + \ell(\ell+1) = 0 \quad \therefore \quad s = -\ell \quad \text{or} \quad \ell + 1$$

$\chi_{\ell}(r) \sim r^{-\ell}$ の方は規格化出来ないのでダメ。

• $\ell = 0$ のとき、同様に $\chi_0(r) \sim r^0$ or r^1

$\chi_0(r) \sim r^0$ のとき、 $\varphi(r) \sim 1/r$ だが

$$\begin{aligned} \hat{H}\varphi(\mathbf{r}) &\sim \left(\frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(r) \right) \frac{1}{r} \\ &\sim \text{const} \cdot \delta(\mathbf{r}) + \frac{V(r)}{r} \neq E\varphi(\mathbf{r}) \sim \frac{1}{r} \end{aligned}$$

よりダメ。

• 結局、

$$\chi_{\ell}(r) \sim r^{\ell+1} \quad (r \rightarrow 0)$$

(ℓ が大きいほど反発。)

$\ell = 0$ 以外は原点の存在確率 $\propto |R(r=0)|^2 = 0$ 。

前回まで (GW 前まで) のあらすじ

1. J
2. $V(\vec{r}) = V(r)$ 中の粒子
 - 2.1 やること
 - 2.2 L と H が可換
 - 2.3 $R(r) \cdots \langle \vec{r} | E, \ell, m \rangle = R(r) Y_{\ell m}(\theta, \phi)$
(5/13 ここから)

§ 2.4 水素原子 (5/13 ~)

クーロンポテンシャル

$$(+) \xrightarrow{r} (-) \quad V(r) = -\frac{A}{r}, \quad \left(A \simeq \frac{1}{137} \hbar c \right)$$

§ 2.4.1 $R(r)$ の微分方程式を解く。

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m} \left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right) - \frac{A}{r} - E \right] R(r) = 0 \quad \dots (1)$$

以下 $E < 0$ の場合 (束縛状態) を考える。

$R(r)$ の規格化は

$$\begin{aligned} 1 &= \int d^3x |\varphi(r, \theta, \phi)|^2 \\ &= \int r^2 dr \int d\cos\theta \int d\phi |R(r) Y_{\ell,m}(\theta, \phi)|^2 = \int r^2 dr |R(r)|^2 \quad \dots (2) \end{aligned}$$

▶ 無次元化するため

$$r = \sqrt{\frac{\hbar^2}{-8mE}} \cdot \rho \quad (\rho : \text{無次元量})$$

として (1) に代入

$$\left[\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{d}{d\rho} - \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2} + \frac{\lambda}{\rho} - \frac{1}{4} \right] \tilde{R}(\rho) = 0 \quad (R(r) = \tilde{R}(\rho)) \quad \dots (1)'$$

ただし

$$\lambda = \sqrt{\frac{m}{-2\hbar^2 E}} \cdot A$$

comment

無次元化するときの係数で、系の典型的なスケールが分かる。

$$\lambda = \sqrt{\frac{E_b}{-E}} \quad \text{where } E_b \equiv \frac{mA^2}{2\hbar^2} \simeq \frac{1}{2} \left(\frac{1}{137} \right)^2 mc^2 \simeq 13.6 \text{ eV}$$

$$\rho = \sqrt{\frac{-E}{E_b}} \cdot \frac{2r}{a_B} \quad \text{where } a_B = \frac{\hbar^2}{mA} \simeq 137 \frac{\hbar}{mc} \simeq 5.3 \times 10^{-11} \text{ m (ボーア半径)}$$

▶ 後はがんばってひたすら (1)' を解く。解ければ何でもよいが、例えば

$$\tilde{R}(\rho) = \rho^\ell e^{-\rho/2} G_\ell(\rho) \dots (3)$$

として (1)' に代入すると

$$\left[\rho \frac{d^2}{d\rho^2} + (2\ell + 2 - \rho) \frac{d}{d\rho} - (1 + \ell - \lambda) \right] G_\ell(\rho) \dots (1)''$$

これは合流型超幾何微分方程式。

→ 解は合流型超幾何関数 (書かない。演習 No.4 + 物数 2 を参照。)

$$\begin{cases} \text{case 1 : } \lambda \neq \ell + 1, \ell + 2, \ell + 3 \dots \\ \text{case 2 : } \lambda = n \quad (n = \ell + 1, \ell + 2, \ell + 3 \dots) \end{cases}$$

▶ case 1 のとき、

解が無級数となって、 $G_\ell(\rho) \sim e^\rho$ ($\rho \rightarrow \infty$) となってしまう。

→ (3) より $\tilde{R}(\rho) \sim e^{\rho/2}$

→ $\int |R(r)|^2 r^2 dr = \infty$

→ 規格化 (2) をみたせないのでダメ。

波動関数が規格化されているためには $\lambda = n$ ($= \ell + 1, \ell + 2 \dots$)

▶ case 2 のとき、

合流型超幾何関数の級数が有限で止まって、(1)'' の解は

$$G_\ell(\rho) \propto L_{n+\ell}^{2\ell+1}(\rho) \dots (4)$$

ただし

$$L_n^m(x) = \frac{d^m}{dx^m} \left[e^x \frac{d^n}{dx^n} (e^{-x} x^n) \right] : \text{ラゲール陪多項式}$$

L_n^m は $(n - m)$ 次多項式。(注: これも定義が何通りかある。)

$L_{n+\ell}^{2\ell+1}$	$n = 1$	$n = 2$	$n = 3$
$\ell = 0$	$L_1^1 = -1$	$L_2^1 = 2x - 4$	$L_3^1 = -3x^2 + 18x - 18$
$\ell = 1$	$L_3^3 = -6$		$L_4^3 = 24x - 96$
$\ell = 2$	$L_5^5 = -120$		

▶ (3)(4) より、解は

$$\tilde{R}(\rho) = N_{n\ell} \rho^\ell e^{-\rho/2} L_{n+\ell}^{2\ell+1}(\rho)$$

規格化定数 $N_{n\ell}$ は、 $\int |R(r)|^2 r^2 dr = 1$ (—(2)) より、

$$N_{n\ell}^2 = \left(\frac{2}{na_B} \right)^3 \frac{(n-\ell-1)!}{2n[(n+\ell)!]^3}$$

と決まる。 (計算は次ページ)

§ 2.4.2 エネルギーの量子化

$\lambda = n(= \ell + 1, \ell + 2, \dots)$ の意味

$$\lambda = \sqrt{\frac{E_b}{-E}} \quad \left(E_b = \frac{mA^2}{2\hbar^2} = 13.6 \text{ eV} \right)$$

を思い出すと、

$$E = -E_b \frac{1}{n^2} \quad (n = \ell + 1, \ell + 2, \dots)$$

(束縛状態の) エネルギーはとびとびの値しかとれない。

ちなみにこのとき、

$$\rho = \sqrt{\frac{-E}{E_b}} \cdot \frac{2r}{a_B} = \frac{2}{n} \frac{r}{a_B} \quad \left(a_B = \frac{\hbar^2}{mA} = 5.3 \times 10^{-11} \text{ m} \right)$$

追加の計算 … $N_{n\ell}$ について一応導出を書いておきます。(5/27 追記)

$$\begin{aligned} 1 &= \int |R_{n\ell}(r)|^2 r^2 dr = \left(\frac{na_B}{2}\right)^3 \int |\tilde{R}_{n\ell}(\rho)|^2 \rho^2 d\rho \\ &= \left(\frac{na_B}{2}\right)^3 N_{n\ell}^2 \int \rho^{2\ell+2} e^{-\rho} [L_{n+\ell}^{2\ell+1}(\rho)]^2 d\rho \quad \text{———}(\star) \end{aligned}$$

ここでラゲール陪多項式の母関数表示¹

$$\sum_{k=m}^{\infty} L_k^m(x) \frac{y^k}{k!} = \frac{(-y)^m}{(1-y)^{m+1}} \exp\left(\frac{-xy}{1-y}\right)$$

より

$$\begin{aligned} &\sum_{k=m}^{\infty} \sum_{j=m}^{\infty} \frac{y^k}{k!} \frac{z^j}{j!} \int x^{m+1} e^{-x} L_k^m(x) L_j^m(x) dx \\ &= \frac{y^m z^m}{(1-y)^{m+1} (1-z)^{m+1}} \int x^{m+1} \exp\left(-\left[\frac{y}{1-y} + \frac{z}{1-z} + 1\right]x\right) dx \\ &= \frac{y^m z^m}{(1-y)^{m+1} (1-z)^{m+1}} (m+1)! \left[\frac{y}{1-y} + \frac{z}{1-z} + 1\right]^{-(m+2)} \\ &= (m+1)! \frac{y^m z^m (1-y)(1-z)}{(1-yz)^{m+2}} \end{aligned}$$

両辺の $y^k z^k$ ($k \geq m$) の項を比べて

$$\begin{aligned} &\frac{1}{(k!)^2} \int x^{m+1} e^{-x} [L_k^m(x)]^2 dx \\ &= (m+1)! \left(\frac{1}{\underbrace{(k-m)!}_{(yz)^{k-m} \text{ from } (1-yz)^{-m-2}} \underbrace{(m+1)!}_{(1-yz)^{-m-2}}} + \frac{1}{\underbrace{(k-m-1)!}_{(yz)^{k-m-1} \text{ from } (1-yz)^{-m-2}} \underbrace{(m+1)!}_{(1-yz)^{-m-2}}} \right) \\ &= \frac{(2k+1-m)k!}{(k-m)!} \end{aligned}$$

よって

$$\int \rho^{2\ell+2} e^{-\rho} [L_{n+\ell}^{2\ell+1}(\rho)]^2 d\rho = \frac{2n[(n+\ell)!]^3}{(n-\ell-1)!}$$

これを (\star) に代入して、 $N_{n\ell}$ を得る。 ——— 追加の計算ここまで

¹この導出まではやりません。物理数学2 参照。

§ 2.4.3 水素原子まとめ

▶ Schrödinger eq

$$\hat{H}|\varphi\rangle = E|\varphi\rangle \quad \left(H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(r), \quad V(r) = -\frac{A}{r} \right)$$

の $E < 0$ の解は

$$E = E_n = -\frac{E_b}{n^2} \quad \left(E_b = \frac{mA^2}{2\hbar^2} = 13.6 \text{ eV} \right)$$

のときだけ存在。

▶ このとき

$$\hat{H}|\varphi_n\rangle = E_n|\varphi_n\rangle$$

の一般解は

$$|\varphi_n\rangle = \sum_{\ell, m} c_{\ell, m} |n, \ell, m\rangle$$

ただし

$$\begin{cases} \hat{H}|n, \ell, m\rangle = E_n|n, \ell, m\rangle & (n = 1, 2, \dots) \\ \hat{L}^2|n, \ell, m\rangle = \ell(\ell + 1)\hbar^2|n, \ell, m\rangle & (\ell = 0, 1, \dots, n-1) \\ \hat{L}_3|n, \ell, m\rangle = m\hbar|n, \ell, m\rangle & (m = -\ell, -\ell + 1, \dots, \ell) \end{cases}$$

▶ 座標表示するとエネルギー固有関数は

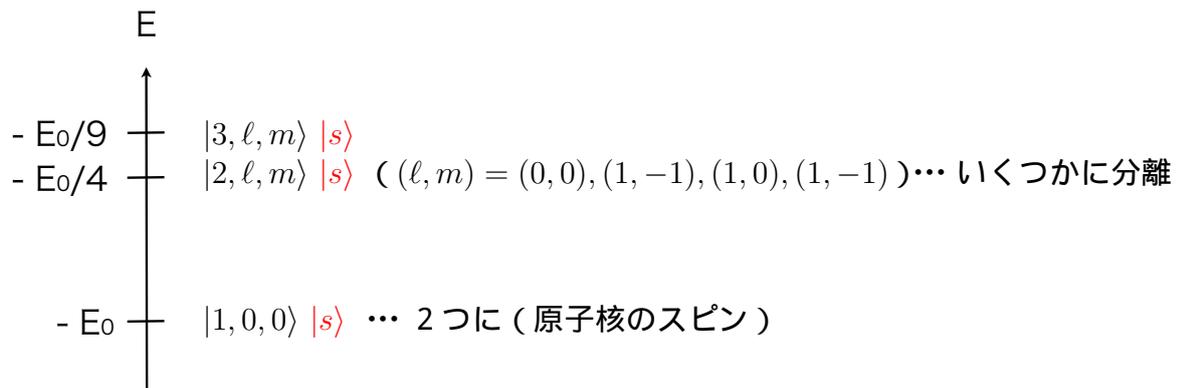
$$\begin{aligned} \underbrace{\langle \mathbf{r} | \varphi_n \rangle}_{= \varphi_n(\mathbf{r})} &= \sum_{\ell, m} c_{\ell, m} \underbrace{\langle \mathbf{r} | n, \ell, m \rangle}_{= \varphi_{n, \ell, m}(r, \theta, \phi)} \\ \varphi_{n, \ell, m}(r, \theta, \phi) &= \tilde{R}_{n, \ell} \left(\frac{2}{na_B} r \right) Y_{\ell, m}(\theta, \phi) \\ \tilde{R}_{n\ell}(x) &= N_{n\ell} e^{-x/2} x^\ell L_{n-\ell}^{2\ell+1}(x) \end{aligned}$$

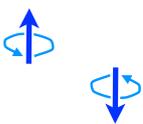
§ 2.4.4 さらに …

ここまでの話で無視した効果

- ▶ 相対論的效果
- ▶ 電子のスピン
- ▶ 原子核のスピン
- ▶ …

これらを含めるとエネルギー準位はさらに分裂する。



- ▶ 電子はスピン $s = 1/2$ を持つ。 \hat{s}_z の固有値は $\pm 1/2$ 。
 水素原子内の電子の状態は $|\vec{r}\rangle \sim |r, \theta, \phi\rangle \sim |n, \ell, m\rangle$ だけでは表せない！ 
 $\rightarrow |\vec{r}; s_z\rangle$ or $|n, \ell, m; s_z\rangle$ ($s_z = \pm \frac{1}{2}$)
- ▶ 例えば基底状態 $|n, \ell, m\rangle = |0, 0, 0\rangle$ にも $|0, 0, 0; \pm \frac{1}{2}\rangle$ の 2 つの状態がある。
- ▶ ちゃんと取り入れるには：
 Schrödinger eq. \rightarrow Dirac eq. \rightarrow (さらに) 場の量子論
- ▶ § 3 で、この一部だけ「LS 結合」として扱う。
- ▶ 全部はやらない(やれない)。水素原子は奥が深い …。

以下 2013 は (たぶん 2014 も) やらない。時間が余れば

§ 2.4.5 重心運動の分離

2 自由度系

原子核 \xleftrightarrow{r} 電子

	質量	位置	運動量
粒子 1	m_1	\mathbf{r}_1	\mathbf{p}_1
粒子 2	m_2	\mathbf{r}_2	\mathbf{p}_2

$$\begin{aligned}
 H &= \frac{\mathbf{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\mathbf{p}_2^2}{2m_2} + V(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|) \\
 &= \frac{\mathbf{p}_{\text{CM}}^2}{2M} + \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(r)
 \end{aligned}$$

ただし

$$\begin{aligned}
 \text{全質量 } M &= m_1 + m_2 \\
 \text{相対質量 } m &= \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \\
 \begin{pmatrix} \text{相対座標 } \mathbf{r} \\ \text{重心座標 } \mathbf{r}_{\text{CM}} \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ m_1/M & m_2/M \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{r}_1 \\ \mathbf{r}_2 \end{pmatrix} \\
 \begin{pmatrix} \mathbf{p} \\ \mathbf{p}_{\text{CM}} \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} m_2/M & -m_1/M \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{p}_1 \\ \mathbf{p}_2 \end{pmatrix}
 \end{aligned}$$

Schrödinger eq.

$$\hat{H}\varphi_{\text{total}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_{\text{CM}}) = E_{\text{total}}\varphi_{\text{total}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_{\text{CM}})$$

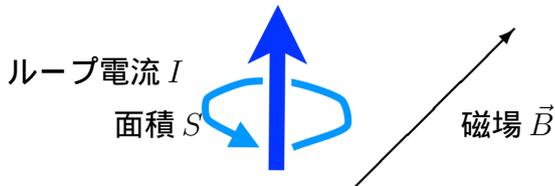
6 変数。 $\varphi_{\text{total}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_{\text{CM}}) = \varphi_{\text{CM}}(\mathbf{r}_{\text{CM}})\varphi(\mathbf{r})$ として

$$\begin{cases} \frac{\hat{\mathbf{p}}_{\text{CM}}^2}{2M}\varphi_{\text{CM}}(\mathbf{r}_{\text{CM}}) = E_{\text{CM}}\varphi_{\text{CM}}(\mathbf{r}_{\text{CM}}) : \text{自由粒子 } \varphi_{\text{CM}} \sim e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \\ \left(\frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + V(r)\right)\varphi(\mathbf{r}) = E\varphi(\mathbf{r}) : \text{この節で考えているのはこっち} \end{cases}$$

すると $E_{\text{total}} = E_{\text{CM}} + E$ 。

§ 3 スピンと磁気モーメント

§ 3.1 一様磁場中のループ電流 単位ベクトル \vec{n}



\vec{n} と \vec{B} をそろえようとする力 (トルク) が働く
エネルギー (ハミルトニアン) で表すと

$$H = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} \quad \text{where } \vec{\mu} = IS\vec{n} \text{ (ループ電流の磁気モーメント)}$$

§ 3.2 角運動量と磁気モーメント (~ 5/13)

古典論 : 円運動する電荷 e の荷電粒子

$$\begin{cases} \text{角運動量} : \vec{L} = mrv \cdot \vec{n} \\ \text{ループ電流} : I = \frac{e}{2\pi r/v} \\ \text{面積} : S = \pi r^2 \end{cases}$$



$$\therefore \text{磁気モーメント} : \vec{\mu} = IS\vec{n} = \frac{e}{2m} \vec{L} \text{ --- (1)}$$

量子論では ?

▶ 軌道角運動量 : (1) がそのまま使えて、磁気モーメント $\hat{\mu}_L = \frac{e}{2m} \hat{L}$

$\ell \neq 0$ の状態にある荷電粒子は磁場中で

$$\hat{H}(\vec{B}) = -\hat{\mu}_L \cdot \vec{B} = -\frac{e}{2m} \hat{L} \cdot \vec{B}$$

のポテンシャルエネルギーを感じる。

▶ スピン角運動量 : (1) がそのままは使えない。 $\hat{\mu}_S \neq \frac{e}{2m} \hat{S}$ 。 **正しくは $\hat{\mu}_S = g \frac{e}{2m} \hat{S}$** 。

$$g = \underbrace{2}_{\text{Dirac eq.}} + \underbrace{\frac{\alpha}{\pi} + \dots}_{\text{QED(場の量子論)}} = 2 \times \underbrace{(1.001159652180 \dots)}_{\text{実験 vs 理論が 10 ケタ以上合ってる!}}$$

5/13 ここまで

(5/20)

▶ 前回の訂正

— (恥ずかしい漢字の間違い)

— § 2.4.1、 $L_3^3(x) = -6$

▶ これまでのあらすじ

§1 角運動量

§2 $V = V(r)$ 内の粒子

§3 スピンと磁気モーメント

§3.1 ループ電流

§3.2 角運動量と磁気モーメント

$$H = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}$$

$$\vec{\mu}_L = \frac{e}{2m} \vec{L}$$

$$\vec{\mu}_S = g \frac{e}{2m} \vec{S}$$

$$g = 2 \times (1.001 \dots)$$

▶ 5/20 ここから

(今日で13コマ中6コマ目。だいたい半分)

▶ レポート … 未提出の人が何人か (必修の人含む)。第二回レポートと期末テストで挽回しましょう。

【注意】

(講義 → 状況次第で追レポ or 追試)

(物理学演習 III → 追レポも追試もありません)

… あらかじめレポートを提出しておきましょう)

§ 3.3 LS 結合 (5/20~)

- ▶ 水素原子中の電子：スピンの効果まで含めると、ハミルトニアンに

$$\hat{H}_{LS} = \xi(r) \hat{L} \cdot \hat{S} \quad \text{という項が加わる。 (LS 結合)}$$

$$\left(\xi(r) = \frac{1}{2mc^2} \cdot \frac{1}{r} \frac{dV(r)}{dr} \cdots \text{Dirac eq. で導ける。} \right)$$

イメージ図：電子の静止系：原子核の運動により中心に磁場が…

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(r) + \xi(r) \hat{L} \cdot \hat{S}$$

- ▶ この系を記述するのに良い量子数は??
 … § 1.4 の議論を思い出すと、2つの可換なセットがあった。

(A) $(\hat{L}^2, \hat{S}^2, \hat{L}_3, \hat{S}_3)$ は全て可換。

$$|\ell, s; m, s_z\rangle : \begin{cases} \hat{L}^2 |\ell, s; m, s_z\rangle = \ell(\ell+1)\hbar^2 |\ell, s; m, s_z\rangle \\ \hat{S}^2 |\cdots\rangle = s(s+1)\hbar^2 |\cdots\rangle \\ \hat{L}_3 |\cdots\rangle = m\hbar |\cdots\rangle \\ \hat{S}_3 |\cdots\rangle = s_z\hbar |\cdots\rangle \end{cases} \quad \text{がとれる。}$$

水素原子の $|n, \ell, m\rangle$ からの素直な拡張。

しかし実は $\hat{H}_{LS} \propto \hat{L} \cdot \hat{S}$ のせいで $[\hat{H}, \hat{L}_3] \neq 0$ 、 $[\hat{H}, \hat{S}_3] \neq 0$ 。

$|\ell, s; m, s_z\rangle$ は \hat{H} の固有ベクトル (エネルギー固有状態) ではない。

(B) $(\hat{L}^2, \hat{S}^2, \hat{J}^2, \hat{J}_3)$ も全て可換。 ($\hat{J}_a = \hat{L}_a + \hat{S}_a$)

$$|\ell, s; m, s_z\rangle : \begin{cases} \hat{L}^2 |\ell, s; J, M\rangle = \ell(\ell+1)\hbar^2 |\ell, s; J, M\rangle \\ \hat{S}^2 |\cdots\rangle = s(s+1)\hbar^2 |\cdots\rangle \\ \hat{J}^2 |\cdots\rangle = J(J+1)\hbar^2 |\cdots\rangle \\ \hat{J}_3 |\cdots\rangle = M\hbar |\cdots\rangle \end{cases} \quad \text{がとれる。}$$

$(\hat{L}^2, \hat{S}^2, \hat{J}^2, \hat{J}_3)$ は \hat{H} と可換なので $|\ell, s; J, M\rangle$ は

(r 方向まで含めると) \hat{H} の固有ベクトル (エネルギー固有状態) に取れる。

… (A) と (B) の関係は § 1.4 の CG 係数で決まっている。

- ▶ ここでは実際に解くことはしない。

§ 3.4 これまでの話を全部合わせると …

磁場中の水素原子のハミルトニアンは

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \hat{H}_0 && + \hat{H}_{LS} && + \hat{H}_B \\ &= \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(r) && + \xi(r) \hat{\vec{L}} \cdot \hat{\vec{S}} && - \frac{e}{2m} \vec{B} \cdot (\hat{\vec{L}} + g\hat{\vec{S}}) \end{aligned}$$

§ 4 摂動で扱う。

§ 3.5 一様磁場中のスピン

$$\text{ハミルトニアン : } \hat{H} = -g \frac{e}{2m} \hat{\vec{S}} \cdot \vec{B} \text{ --- (1)}$$

例えばスピン 1/2 の状態

$$|\psi(t)\rangle = \alpha(t) |\uparrow\rangle + \beta(t) |\downarrow\rangle \text{ --- (2)}$$

の時間発展はどーなる？

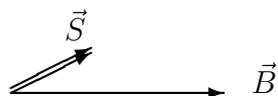
$$\text{Schrödinger eq. } i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle$$

に (1)(2) を代入して、 $\langle \uparrow | \times$ や $\langle \downarrow | \times$ とすると (式変形は次ページも参照)

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \alpha(t) \\ \beta(t) \end{pmatrix} &= -g \frac{e}{2m} \vec{B} \cdot \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma} \begin{pmatrix} \alpha(t) \\ \beta(t) \end{pmatrix} \\ \therefore \begin{pmatrix} \alpha(t) \\ \beta(t) \end{pmatrix} &= \exp \left[i \left(g \frac{e}{4m} \vec{B} \cdot \vec{\sigma} \right) t \right] \begin{pmatrix} \alpha(0) \\ \beta(0) \end{pmatrix} \\ &= \left[\cos \omega t \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + i \sin \omega t \frac{\vec{B} \cdot \vec{\sigma}}{|\vec{B}|} \right] \begin{pmatrix} \alpha(0) \\ \beta(0) \end{pmatrix} \quad \text{where } \omega = g \frac{e|\vec{B}|}{4m} \end{aligned}$$

→ 周期 $T = \frac{2\pi}{\omega} = \frac{2\pi \cdot 4m}{ge|\vec{B}|}$ で振動する。

スピンの期待値 $\langle \psi(t) | \hat{S} | \psi(t) \rangle$ は歳差運動する。
(周期は半分の $T/2$ となる。各自やってみよう。)



追加の解説 (5/20 講義の後で追記)

前のページの式変形について講義の後で質問があったので途中式を書いておきます。

$$\begin{aligned}(\sigma_i)^2 &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \text{for } i = 1, 2, 3 \\ \sigma_i \sigma_j + \sigma_j \sigma_i &= 2\delta_{ij} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \\ (\vec{v} \cdot \vec{\sigma})^2 &= \left(\sum_i v_i \sigma_i \right)^2 = (v_1^2 + v_2^2 + v_3^2) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = |\vec{v}|^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \\ (\vec{v} \cdot \vec{\sigma})^n &= \begin{cases} |\vec{v}|^n \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} & \text{for } n = \text{even} \\ |\vec{v}|^n \frac{\vec{v} \cdot \vec{\sigma}}{|\vec{v}|} & \text{for } n = \text{odd} \end{cases} \\ e^{i\vec{v} \cdot \vec{\sigma}} &= \sum_{n=0} \frac{1}{n!} (i\vec{v} \cdot \vec{\sigma})^n \\ &= \sum_{n=\text{even}} \frac{(i)^n}{n!} |\vec{v}|^n \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + \sum_{n=\text{odd}} \frac{(i)^n}{n!} |\vec{v}|^n \frac{\vec{v} \cdot \vec{\sigma}}{|\vec{v}|} \\ &= \cos |\vec{v}| \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + i \sin |\vec{v}| \frac{\vec{v} \cdot \vec{\sigma}}{|\vec{v}|} \end{aligned}$$

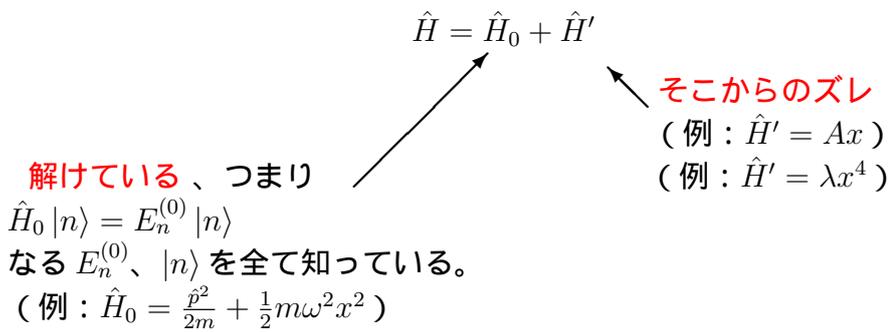
——— 追加の解説ココまで

§ 4 様々な近似法

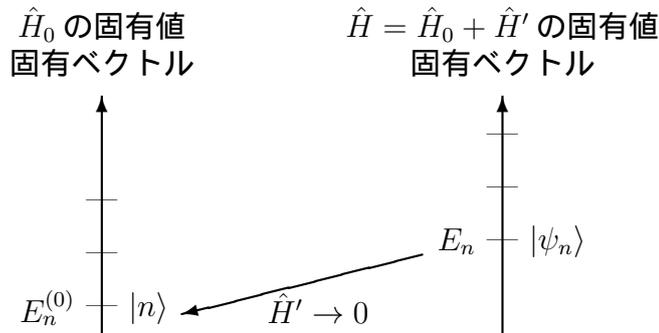
§ 4.1 摂動論 (定常状態)

§ 4.1.1 やりたいこと

$$\hat{H} |\psi_n\rangle = E_n |\psi_n\rangle \quad \text{を解きたい}$$



$\hat{H}' \rightarrow 0$ のとき、 $|\psi_n\rangle \rightarrow |n\rangle$ 、 $E_n \rightarrow E_n^{(0)}$ となるはず。



このとき、 $|\psi_n\rangle$ 、 E_n を「 \hat{H}' の級数展開」として解きたい。

コメント・注

- 無限級数が収束しない場合もある。(上の $\hat{H}' = \lambda x^4$ の例)
→ 「漸近級数」
- 展開しなくても厳密に解ける場合もある。(上の $\hat{H}' = Ax$ の例)
→ 摂動のチェックになる。

§ 4.1.2 縮退なしの状態 (~5/20、5/27~)

▶ $(\hat{H}_0 + \lambda \hat{H}') |\psi_n(\lambda)\rangle = E_n(\lambda) |\psi_n(\lambda)\rangle$ ——(1) を解きたい。

↑
解けている : $\hat{H}_0 |n\rangle = E_n^{(0)} |n\rangle$

$$\text{完全系} \begin{cases} \langle m|n\rangle = \delta_{mn} \\ \sum_n |n\rangle \langle n| = \mathbf{1} \end{cases} \text{—————(2)}$$

▶ \hat{H}_0 の固有値に対して 縮退のない状態ベクトル $|n\rangle$ に注目する。

$$E_m^{(0)} \neq E_n^{(0)} \quad \text{for } m \neq n \quad (|n\rangle \text{ 以外は縮退していてもよい。})$$

▶ **摂動論 : λ で展開する。**

$$E_n(\lambda) = \sum_{p=0}^{\infty} \lambda^p E_n^{(p)} = E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \dots \text{—————(3)}$$

$$|\psi_n(\lambda)\rangle = \sum_{p=0}^{\infty} \lambda^p |n^{(p)}\rangle = |n\rangle + \lambda |n^{(1)}\rangle + \lambda^2 |n^{(2)}\rangle + \dots \text{—————(4)}$$

ただし $\lambda \rightarrow 0$ で $|\psi_n(\lambda)\rangle \rightarrow |n\rangle$ 、 $E_n(\lambda) \rightarrow E_n^{(0)}$ を使った。

▶ **注意 : (4) の展開には不定性がある。**

例えば $|\psi_n(\lambda)\rangle \rightarrow (1 + c\lambda) |\psi_n(\lambda)\rangle$ としても (1) の解になっている。

→ $|\psi_n(\lambda)\rangle$ の規格化を決める必要がある。

$$\text{例えば} \quad \langle \psi_n(\lambda) | \psi_n(\lambda) \rangle = 1 \quad \text{—————(*)}$$

$$\text{あるいは} \quad \langle n | \psi_n(\lambda) \rangle = 1 \quad \text{—————(**)}$$

など。

▶ (3)(4) を (1) に代入すると

$$(\hat{H}_0 + \lambda \hat{H}') \left(\sum \lambda^p |n^{(p)}\rangle \right) = \left(\sum \lambda^q E_n^{(q)} \right) \left(\sum \lambda^p |n^{(p)}\rangle \right)$$

両辺の λ^p の項を比べると

$$\hat{H}_0 |n^{(p)}\rangle + \hat{H}' |n^{(p-1)}\rangle = \sum_{k=0}^p E_n^{(p-k)} |n^{(k)}\rangle \text{-----}(1')$$

(5 / 2 0 この辺まで。中途半端だが次回つづく。)

(5 / 2 7 つづきから)

前回

$$(\hat{H}_0 + \lambda \hat{H}') |\psi_n(\lambda)\rangle = E_n(\lambda) |\psi_n(\lambda)\rangle$$

$$E_n(\lambda) = \sum_{p=0}^{\infty} \lambda^p E_n^{(p)}$$

$$|\psi_n(\lambda)\rangle = \sum_{p=0}^{\infty} \lambda^p |n^{(p)}\rangle$$

$$\Rightarrow \hat{H}_0 |n^{(p)}\rangle + \hat{H}' |n^{(p-1)}\rangle = \sum_{k=0}^p E_n^{(p-k)} |n^{(k)}\rangle \text{-----}(1')$$

今日ココから

ここから $E_n^{(p)}$ 、 $|n^{(p)}\rangle$ に関する以下の漸化式が得られる。

$$E_n^{(p)} = \langle n | \hat{H}' |n^{(p-1)}\rangle - \sum_{k=1}^{p-1} E_n^{(p-k)} \langle n | n^{(k)}\rangle \text{-----}(5)$$

$$|n^{(p)}\rangle = c_n^{(p)} |n\rangle + \sum_{m \neq n} \langle m | n^{(p)}\rangle |m\rangle \text{-----}(6)$$

where, for $m \neq n$,

$$\langle m | n^{(p)}\rangle = \frac{1}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \left[\langle m | \hat{H}' |n^{(p-1)}\rangle - \sum_{k=1}^{p-1} E_n^{(p-k)} \langle m | n^{(k)}\rangle \right] \text{-----}(7)$$

$c_n^{(p)}$ は、ベクトルの規格化や位相因子を決めないと決まらない。

proof

(1') より

$$\begin{aligned} \underbrace{\langle m|\hat{H}_0|n^{(p)}\rangle}_{E_m^{(0)}\langle m|n^{(p)}\rangle} + \langle m|\hat{H}'|n^{(p-1)}\rangle &= \sum_{k=0}^p E_n^{(p-k)} \langle m|n^{(k)}\rangle \\ &= E_n^{(p)} \underbrace{\langle m|n^{(0)}\rangle}_{=\langle m|n\rangle=\delta_{mn}} + \sum_{k=1}^{p-1} E_n^{(p-k)} \langle m|n^{(k)}\rangle + E_n^{(0)} \langle m|n^{(p)}\rangle \end{aligned}$$

▶ $m = n$ のとき

$$\langle n|\hat{H}'|n^{(p-1)}\rangle = E_n^{(p)} + \sum_{k=1}^{p-1} E_n^{(p-k)} \langle n|n^{(k)}\rangle \quad \Longrightarrow (5)$$

▶ $m \neq n$ のとき

$$E_m^{(0)} \langle m|n^{(p)}\rangle + \langle m|\hat{H}'|n^{(p-1)}\rangle = \sum_{k=1}^{p-1} E_n^{(p-k)} \langle m|n^{(k)}\rangle + E_n^{(0)} \langle m|n^{(p)}\rangle \quad \Longrightarrow (7)$$

proof おしまい

▶ (5)(6)(7) より、 $\langle n|\hat{H}'|m\rangle = H'_{nm}$ と書くと

$p = 1$

$$E_n^{(1)} = H'_{nn} \quad \text{—————(8)}$$

$$|n^{(1)}\rangle = c_n^{(1)} |n\rangle + \sum_{m \neq n} \frac{H'_{mn}}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} |m\rangle$$

$p = 2$

$$E_n^{(2)} = \langle n|\hat{H}'|n^{(1)}\rangle - E_n^{(1)}\langle n|n^{(1)}\rangle$$

$$= c_n^{(1)} \underbrace{\langle n|\hat{H}'|n\rangle}_{=H'_{nn}=E_n^{(1)}} + \sum_{m \neq n} \frac{H'_{mn}}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \underbrace{\langle n|\hat{H}'|m\rangle}_{=H'_{nm}=H'_{mn}^*} - E_n^{(1)} c_n^{(1)}$$

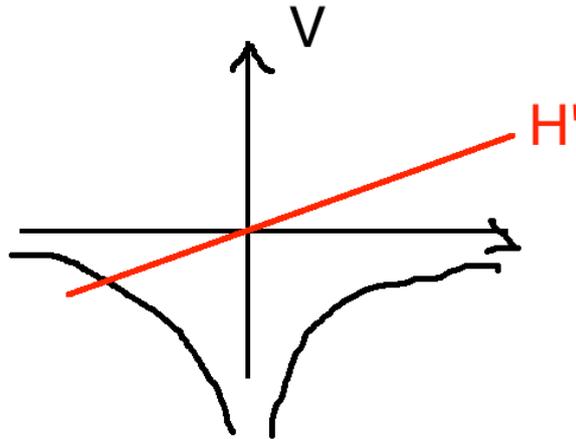
$$= \sum_{m \neq n} \frac{|H'_{mn}|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \quad \text{—————(9)}$$

$$|n^{(2)}\rangle = c_n^{(2)} |n\rangle + \sum_{m \neq n} \frac{1}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \langle m|(\hat{H}' - E_n^{(1)})|n^{(1)}\rangle |m\rangle$$

$$= \dots$$

comments

1. 状態ベクトル $|n^{(p)}\rangle$ には $c_n^{(p)}$ の不定性があるが、物理量であるエネルギー $E_n^{(p)}$ からはちゃんと不定性が消えている。
2. 上の式は $E_n^{(0)} - E_m^{(0)} \neq 0$ でないと使えない。
 $\rightarrow E_n^{(0)} - E_m^{(0)} = 0$ の時はどうなるか?? \rightarrow § 4.1.3



▶ 例：Stark 効果（基底状態）

$$\hat{H}_0 = -\frac{\hat{p}^2}{2m} - \frac{A}{r} \quad \text{水素原子ポテンシャル：} \quad A \simeq \frac{1}{137} \hbar c$$

$$\hat{H}' = eEz \quad z \text{ 方向に電場をかける}$$

（スピンは無視）

電場をかける前の、 \hat{H}_0 の固有値と固有ベクトルは

$$\hat{H}_0 |n, \ell, m\rangle = E_{n,\ell,m}^{(0)} |n, \ell, m\rangle,$$

$$E_{n,\ell,m}^{(0)} = -\frac{A}{2a_B} \frac{1}{n^2} \quad \left(a_B = \frac{\hbar^2}{mA} \simeq 137 \frac{\hbar}{mc} \right)$$

ここでは \hat{H}_0 の基底状態 $|n, \ell, m\rangle = |1, 0, 0\rangle$ のエネルギー $E_{1,0,0}$ の、電場によるずれを求める。（スピンは無視）

▶ \hat{H}' は

$$\hat{H}' = \lambda \frac{A}{a_B^2} z \quad \left(\lambda = eE \frac{a_B^2}{A} \quad \text{無次元量} \right)$$

と書ける。 $\lambda \ll 1$ として摂動展開する。

▶ (8)(9) より、

$$E_{1,0,0}^{(1)} = \langle 1, 0, 0 | \hat{H}' | 1, 0, 0 \rangle$$

$$E_{1,0,0}^{(2)} = \sum_{(n,\ell,m) \neq (1,0,0)} \frac{|\langle n, \ell, m | \hat{H}' | 1, 0, 0 \rangle|^2}{E_{1,0,0}^{(0)} - E_{n,\ell,m}^{(0)}}$$

§ 2 より

$$\begin{aligned}
 \langle n, \ell, m | \hat{H}' | 1, 0, 0 \rangle &= \int d^3x \int d^3x' \langle n, \ell, m | \vec{x} \rangle \cdot \langle \vec{x} | \hat{H}' | \vec{x}' \rangle \cdot \langle \vec{x}' | 1, 0, 0 \rangle \\
 &= \int d^3x \int d^3x' \varphi_{n,\ell,m}(\vec{x})^* \cdot \lambda \frac{A}{a_B^2} z \delta^{(3)}(\vec{x} - \vec{x}') \cdot \varphi_{1,0,0}(\vec{x}') \\
 &= \lambda \frac{A}{a_B^2} \int_0^\infty r^2 dr \int_{-1}^1 d \cos \theta \int_0^{2\pi} d\phi \varphi_{n,\ell,m}(\vec{x})^* \cdot r \cos \theta \cdot \varphi_{1,0,0}(\vec{x})
 \end{aligned}$$

§ 2.4.3 より (途中計算は次ページも参照)

$$\begin{aligned}
 \varphi_{n,\ell,m}(r, \theta, \phi) &= R_{n\ell}(r) Y_{\ell,m}(\theta, \phi) \\
 R_{n\ell}(r) &= \tilde{R}_{n\ell} \left(\frac{2r}{na_B} \right), \quad \tilde{R}_{n\ell}(x) = N_{n\ell} e^{-x/2} x^\ell L_{n+\ell}^{2\ell+1}(x) \\
 \therefore \langle n, \ell, m | \hat{H}' | 1, 0, 0 \rangle &= \lambda \frac{A}{a_B} \underbrace{\int d \cos \theta d\phi Y_{\ell,m}^*(\theta, \phi) \cdot \cos \theta \cdot Y_{0,0}(\theta, \phi)}_{= \sqrt{\frac{1}{3}} \delta_{\ell,1} \delta_{m,0}} \\
 &\quad \times \underbrace{\int r^2 dr R_{n\ell}^*(r) \cdot \frac{r}{a_B} \cdot R_{1,0}(r)}_{\rightarrow \ell=1} \\
 &= I_n = \dots = 16n^{7/2} (n-1)^{n-5/2} (n+1)^{-n-5/2}
 \end{aligned}$$

▶ 以上より

$$E_{1,0,0}^{(0)} = -\frac{A}{2a_B}$$

$$E_{1,0,0}^{(1)} = 0$$

$$\begin{aligned}
 E_{1,0,0}^{(2)} &= \sum_{n=2}^{\infty} \frac{|\langle n, 1, 0 | \hat{H}' | 1, 0, 0 \rangle|^2}{E_{n,1,0} - E_{n,\ell,m}} \\
 &= \sum_{n=2}^{\infty} \frac{\left| \lambda \frac{A}{a_B} \sqrt{\frac{1}{3}} I_n \right|^2}{-\frac{A}{2a_B} \left(1 - \frac{1}{n^2} \right)} = -\lambda^2 \frac{A}{a_B} \frac{2}{3} \underbrace{\sum_{n=2}^{\infty} \frac{|I_n|^2}{1 - 1/n^2}}_{\simeq 1.83}
 \end{aligned}$$

(実は連続スペクトルも効いて、全部足すと $\simeq 2.25$)

(参考：現代物理学の基礎 3 (岩波))

▶ Stark 効果：コメント

(図を描いて) 実は不安定

$z \rightarrow -\infty$ で $V \rightarrow -\infty$ 。

$\hat{H} = \hat{H}_0 + \lambda \hat{H}'$ の固有値は連続スペクトル

じゃあ求めた $E_{1,0,0}(\lambda) = E_{1,0,0}^{(0)} + \lambda^2 E_{1,0,0}^{(2)} + \dots$ は何だ？

$$|\psi_{1,0,0}(\lambda)\rangle = \sum_{k=0}^{\infty} |1, 0, 0^{(k)}\rangle$$

という状態は、エネルギー固有状態ではないが、
準安定状態を表す。

トンネル効果の確率 $\propto e^{-1/2\lambda} \lllll 1$ (トンネル効果の図)

(参考：現代物理学の基礎 3 (岩波))

▶ 追加の解説 (5/27 講義の後で追記)

前のページの途中式の計算について書いておきます。

$$\begin{aligned} & \int d \cos \theta d \phi Y_{\ell, m}^*(\theta, \phi) \cdot \cos \theta \cdot Y_{0,0}(\theta, \phi) \\ &= \int d \cos \theta d \phi Y_{\ell, m}^*(\theta, \phi) \cdot \sqrt{\frac{4\pi}{3}} Y_{1,0}(\theta, \phi) \cdot \sqrt{\frac{1}{4\pi}} \\ &= \sqrt{\frac{1}{3}} \underbrace{\int d \cos \theta d \phi Y_{\ell, m}^*(\theta, \phi) Y_{1,0}(\theta, \phi)}_{=\delta_{\ell,1} \delta_{m,0}} \end{aligned}$$

これで $\int d \cos \theta d \phi$ の方が示せました。動径方向は少し大変ですが、

$$\begin{aligned} & \int_0^{\infty} r^2 dr R_{n,1}^*(r) \cdot \frac{r}{a_B} \cdot R_{1,0}(r) \\ &= \int_0^{\infty} r^2 dr \tilde{R}_{n,1} \left(\frac{2r}{na_B} \right) \cdot \frac{r}{a_B} \cdot \tilde{R}_{1,0} \left(\frac{2r}{a_B} \right) \\ & \left[r = \frac{na_B}{2} x \right] \\ &= \frac{n^4 a_B^3}{16} \int_0^{\infty} x^2 dx \tilde{R}_{n,1}(x) \cdot x \cdot \tilde{R}_{1,0}(nx) \\ &= \frac{n^4 a_B^3}{16} \int_0^{\infty} x^2 dx [N_{n,1} e^{-x/2} x L_{n+1}^3(x)] \cdot x \cdot [N_{1,0} e^{-nx/2} L_1^1(nx)] \\ &= \frac{n^4 a_B^3}{16} N_{n,1} N_{1,0} (-1) \int_0^{\infty} dx x^4 \exp \left(-\frac{n+1}{2} x \right) L_{n+1}^3(x) \end{aligned}$$

ここで § 2.4 より

$$N_{n,1} = \sqrt{\left(\frac{2}{na_B}\right)^3 \frac{(n-2)!}{2n[(n+1)!]^3}} = \frac{2}{n^2(n+1)!a_B^{3/2}} \sqrt{\frac{1}{(n+1)n(n-1)}}$$

$$N_{1,0} = \sqrt{\left(\frac{2}{a_B}\right)^3 \frac{1}{2}} = \frac{2}{a_B^{3/2}}$$

さらにラゲール陪多項式の母関数表示²

$$\sum_{k=m}^{\infty} L_k^m(x) \frac{y^k}{k!} = \frac{(-y)^m}{(1-y)^{m+1}} \exp\left(\frac{-xy}{1-y}\right)$$

を用いて

$$\begin{aligned} \sum_{k=3}^{\infty} \frac{y^k}{k!} \int dx x^4 \exp\left(-\frac{n+1}{2}x\right) L_k^3(x) &= \frac{(-y)^3}{(1-y)^4} \int_0^{\infty} dx x^4 \exp\left[-\left(\frac{n+1}{2} + \frac{y}{1-y}\right)x\right] \\ &= \frac{(-y)^3}{(1-y)^4} \left(\frac{n+1}{2} + \frac{y}{1-y}\right)^{-5} 4! \\ &= \frac{4! \cdot 2^5}{(n+1)^5} y^3 (y-1) \left(1 - \frac{n-1}{n+1}y\right)^{-5} \end{aligned}$$

両辺の y^{n+1} の項を比べて

$$\begin{aligned} &\frac{1}{(n+1)!} \int dx x^4 \exp\left(-\frac{n+1}{2}x\right) L_{n+1}^3(x) \\ &= \frac{4! \cdot 2^5}{(n+1)^5} \cdot \left(\frac{1}{(n-3)!} \left[\frac{n-1}{n+1}\right]^{n-3} \frac{(n+1)!}{4!} - \frac{1}{(n-2)!} \left[\frac{n-1}{n+1}\right]^{n-2} \frac{(n+2)!}{4!}\right) \\ &= -2^6 n^2 \frac{(n-1)^{n-2}}{(n+1)^{n+2}} \end{aligned}$$

全て代入して

$$\begin{aligned} &\int_0^{\infty} r^2 dr R_{n,1}^*(r) \cdot \frac{r}{a_B} \cdot R_{1,0}(r) \\ &= \frac{n^4 a_B^3}{16} \cdot \frac{2}{n^2(n+1)!a_B^{3/2}} \sqrt{\frac{1}{(n+1)n(n-1)}} \cdot \frac{2}{a_B^{3/2}} \cdot (-1) \cdot (n+1)!(-1)2^6 n^2 \frac{(n-1)^{n-2}}{(n+1)^{n+2}} \\ &= 16 \cdot n^{7/2} \cdot \frac{(n-1)^{n-5/2}}{(n+1)^{n+5/2}} \end{aligned}$$

よって I_n が得られた。 ———— 追加の解説ココまで

²この導出は省略します。物理数学2 参照。

§ 4.1.3 縮退ありの状態 (5/27、6/3)

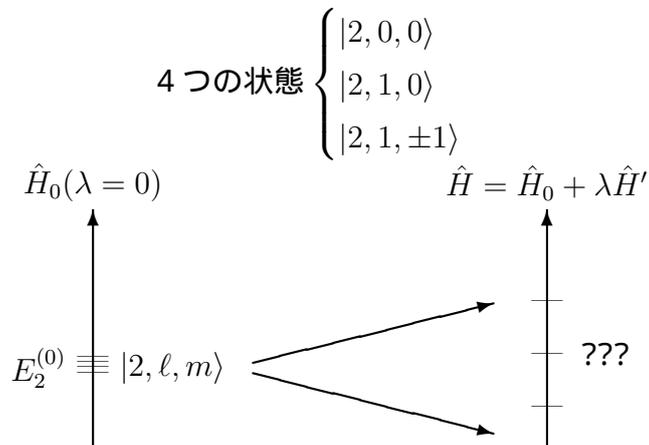
(例) Stark 効果 ($n = 2$)

$$\hat{H}_0 = -\frac{\hat{p}^2}{2m} - \frac{A}{r} \quad \text{スピン無視}$$

$$\lambda \hat{H}' = eEz$$

§ 4.1.2 の例と同じ。ただし $|2, \ell, m\rangle$ に注目。

$$\hat{H}_0 |2, \ell, m\rangle = E_2^{(0)} |2, \ell, m\rangle \quad \left(E_2^{(0)} = -\frac{A}{8a_B} \right)$$



ちょっと寄り道

(5/27 ココまで。)

(6/3 ココから。)

§ 4.1.A ハミルトニアン \iff 行列 (6/3)

step 1

$\hat{H} |\psi_a\rangle = E_a |\psi_a\rangle$ を解きたい

$\begin{matrix} \uparrow \\ \downarrow \end{matrix}$
 ある完全系 $\{|n\rangle\}$ を知っているとき $\dots \left(\begin{matrix} \langle n|m\rangle = \delta_{nm} \\ \sum_n |n\rangle \langle n| = \mathbf{1} \end{matrix} \right)$

行列 $\langle n|\hat{H}|m\rangle$ の固有値、固有ベクトルを求める問題と同値。

$$\begin{aligned} \because \quad & \hat{H} |\psi_a\rangle = E_a |\psi_a\rangle \text{----- (A)} \\ \iff & \langle n|H|\psi_a\rangle = \langle n|E_a|\psi_a\rangle \\ \iff & \sum_m \underbrace{\langle n|H|m\rangle}_{\equiv H_{nm}} \underbrace{\langle m|\psi_a\rangle}_{\equiv u_{a,m}} = E_a \langle n|\psi_a\rangle \\ \iff & \sum_m H_{nm} u_{a,m} = E_a u_{a,n} \\ \iff & \begin{pmatrix} H_{11} & H_{12} & \cdots \\ H_{21} & & \\ \cdots & & \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{a,1} \\ u_{a,2} \\ \cdots \end{pmatrix} = E_a \begin{pmatrix} u_{a,1} \\ u_{a,2} \\ \cdots \end{pmatrix} \text{----- (B)} \end{aligned}$$

(A)(B) 見比べて

行列 H_{nm}	ハミルトニアン \hat{H}
固有値 E_a	固有値 E_a
固有ベクトル	固有ベクトル
$\vec{u}_a = \begin{pmatrix} u_{a,1} \\ u_{a,2} \\ \cdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \langle 1 \psi_a\rangle \\ \langle 2 \psi_a\rangle \\ \cdots \end{pmatrix}$	$ \psi_a\rangle = \sum_m m\rangle \langle m \psi_a\rangle = \sum_m u_{a,m} m\rangle$

コメント 1 H_{nm} はエルミート行列 \rightarrow 固有値 E_a は実数。

$$H_{nm}^* = \langle n | \hat{H} | m \rangle^* = \langle m | \underbrace{\hat{H}^\dagger}_{=\hat{H}} | n \rangle = H_{mn}$$

コメント 2 $|\psi_a\rangle$ を $\langle \psi_a | \psi_b \rangle = \delta_{ab}$ と規格化すれば

$$\vec{u}_a^\dagger \vec{u}_b = \sum_n \langle \psi_a | n \rangle \langle n | \psi_b \rangle = \langle \psi_a | \psi_b \rangle = \delta_{ab}$$

よって固有ベクトル \vec{u}_a が全て求まったとすると

行列 $U = (\vec{u}_1 \vec{u}_2 \cdots)$ はユニタリー行列。

$$\left(U^\dagger U = \begin{pmatrix} \vec{u}_1^\dagger \\ \vec{u}_2^\dagger \\ \cdots \end{pmatrix} (\vec{u}_1 \vec{u}_2 \cdots) = \begin{pmatrix} 1 & & \\ & 1 & \\ & & \cdots \end{pmatrix} = \mathbf{1} \right)$$

コメント 3

$$\sum_m H_{nm} \vec{u}_{a,m} = E_a \vec{u}_{a,n} \quad \text{より}$$

$$(H) \underbrace{(\vec{u}_1 \vec{u}_2 \cdots)}_U = \underbrace{(\vec{u}_1 \vec{u}_2 \cdots)}_U \begin{pmatrix} E_1 & & \\ & E_2 & \\ & & \cdots \end{pmatrix}$$

$$\therefore U^\dagger(H)U = \begin{pmatrix} E_1 & & \\ & E_2 & \\ & & \cdots \end{pmatrix} \quad \text{ハミルトニアンに対角化}$$

step 2 摂動 (縮退なし)

$$(\hat{H}_0 + \lambda \hat{H}') |\psi_n(\lambda)\rangle = E_n(\lambda) |\psi_n(\lambda)\rangle \quad \text{を解きたい}$$

$$\begin{array}{c} \uparrow \\ \text{完全系 } |n\rangle : \hat{H}_0 |n\rangle = E_n^{(0)} |n\rangle \\ \downarrow \end{array}$$

$$\begin{aligned} \text{行列 } H_{nm} &= \langle n | (\hat{H}_0 + \lambda \hat{H}') | m \rangle \\ &= E_n^{(0)} \delta_{nm} + \lambda \underbrace{\langle n | \hat{H}' | m \rangle}_{H'_{nm}} \quad \text{の固有値、固有ベクトルが分かれば良い} \end{aligned}$$

$$\left[\begin{pmatrix} E_1^{(0)} & & \\ & E_2^{(0)} & \\ & & \dots \end{pmatrix} + \lambda \begin{pmatrix} H'_{11} & H'_{12} & \dots \\ H'_{21} & H'_{22} & \dots \\ \dots & & \dots \end{pmatrix} \right] \underbrace{\begin{pmatrix} \langle 1 | \psi_n(\lambda) \rangle \\ \langle 2 | \psi_n(\lambda) \rangle \\ \dots \end{pmatrix}}_{\equiv \vec{u}_n(\lambda)} = E_n(\lambda) \underbrace{\begin{pmatrix} \langle 1 | \psi_n(\lambda) \rangle \\ \langle 2 | \psi_n(\lambda) \rangle \\ \dots \end{pmatrix}}_{\equiv \vec{u}_n(\lambda)}$$

$$\text{摂動 : } \begin{cases} E_n(\lambda) = E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \dots \\ \vec{u}_n(\lambda) = \vec{u}_n^{(0)} + \lambda \vec{u}_n^{(1)} + \lambda^2 \vec{u}_n^{(2)} + \dots \\ (\langle k | \psi_n(\lambda) \rangle = \langle k | n^{(0)} \rangle + \lambda \langle k | n^{(1)} \rangle + \lambda^2 \langle k | n^{(2)} \rangle + \dots) \end{cases}$$

λの0次

$$\begin{pmatrix} E_1^{(0)} & & \\ & E_2^{(0)} & \\ & & \dots \end{pmatrix} \vec{u}_n^{(0)} = E_n^{(0)} \vec{u}_n^{(0)} \quad \therefore \vec{u}_n^{(0)} = \begin{pmatrix} 0 \\ \dots \\ 1 \\ \dots \\ 0 \end{pmatrix} \leftarrow n \text{ 番目}$$

λの1次

$$\begin{pmatrix} E_1^{(0)} & & \\ & E_2^{(0)} & \\ & & \dots \end{pmatrix} \vec{u}_n^{(1)} + \begin{pmatrix} H'_{11} & H'_{12} & \dots \\ H'_{21} & H'_{22} & \dots \\ \dots & & \dots \end{pmatrix} \vec{u}_n^{(0)} = E_n^{(0)} \vec{u}_n^{(1)} + E_n^{(1)} \vec{u}_n^{(0)}$$

$$\begin{aligned}
\underline{\text{第 } n \text{ 成分}} \quad E_n^{(0)} (\vec{u}_n^{(1)})_n + H'_{nn} &= E_n^{(0)} (\vec{u}_n^{(1)})_n + E_n^{(1)} \quad \therefore \underline{E_n^{(1)} = H'_{nn}} \\
\underline{\text{第 } m(\neq n) \text{ 成分}} \quad E_m^{(0)} (\vec{u}_n^{(1)})_m + H'_{mn} &= E_n^{(0)} (\vec{u}_n^{(1)})_m + 0 \\
\therefore (\vec{u}_n^{(1)})_m &= \frac{H'_{mn}}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} = \underline{\langle m|n^{(1)} \rangle}
\end{aligned}$$

§ 4.1.2 の結果を再現。

step 3 縮退あり

$$\hat{H}_0 |n, \alpha\rangle = E_n^{(0)} |n, \alpha\rangle \quad \alpha = 1, 2, \dots, N_n \text{ (縮退度)}$$

\hat{H}_0 の行列表示

$$\langle n | \hat{H}_0 | m \rangle = \left(\begin{array}{ccc|ccc|ccc} E_1^{(0)} & & & & & & & & & & & \\ & E_2^{(0)} & & & & & & & & & & \\ & & \dots & & & & & & & & & \\ \hline & & & E_n^{(0)} & & & & & & & & \\ & & & & E_n^{(0)} & & & & & & & \\ & & & & & \dots & & & & & & \\ & & & & & & E_n^{(0)} & & & & & \\ \hline & & & & & & & & \dots & & & \\ & & & & & & & & & \dots & & \\ & & & & & & & & & & \dots & \\ \hline & & & & & & & & & & & \dots \end{array} \right) \left. \begin{array}{l} N_n \times N_n \text{ 行列} \\ \langle n, \alpha | \hat{H}_0 | n, \beta \rangle \\ = E_n^{(0)} \delta_{\alpha\beta} \end{array} \right\}$$

解きたいのは

$$\left[\left(\begin{array}{ccc|ccc|ccc} E_1^{(0)} & & & & & & & & & & & \\ & \dots & & & & & & & & & & \\ \hline & & & E_n^{(0)} \mathbf{1}_{N_n \times N_n} & & & & & & & & \\ & & & & & \dots & & & & & & \end{array} \right) + \lambda (H') \right] \vec{u} = E \vec{u}$$

特に $\lambda \rightarrow 0$ で $E \rightarrow E_n^{(0)}$ となる成分に注目する。

$$\begin{cases} E_{n,\alpha}(\lambda) = E_n^{(0)} + \sum_{k=1}^{\infty} \lambda^k E_{n,\alpha}^{(k)} \\ \vec{u}_{n,\alpha}(\lambda) = \vec{u}_{n,\alpha}^{(0)} + \sum_{k=1}^{\infty} \lambda^k \vec{u}_{n,\alpha}^{(k)} \end{cases} \quad (\alpha = 1, \dots, N_n)$$

λ の 0 次

$$\left(\begin{array}{c|c|c} \dots & & \\ \hline & E_n^{(0)} \mathbf{1}_{N_n \times N_n} & \\ \hline & & \dots \end{array} \right) \vec{u}_{n,\alpha}^{(0)} = E_n^{(0)} \vec{u}_{n,\alpha}^{(0)}$$

これだけでは $\vec{u}_{n,\alpha}^{(0)}$ は決まらない!

$$\vec{u}_{n,\alpha}^{(0)} = \begin{pmatrix} 0 \\ \dots \\ \vec{\chi}_\alpha \\ \dots \\ 0 \end{pmatrix} \} \text{ 任意の } N_n \text{ 成分ベクトル}$$

λ の 1 次

$$\left(\begin{array}{c|c|c} \dots & & \\ \hline & E_n^{(0)} \mathbf{1}_{N_n \times N_n} & \\ \hline & & \dots \end{array} \right) \vec{u}_{n,\alpha}^{(1)} + \left(\begin{array}{c|c|c} & & \\ \hline & H' & \\ \hline & & \end{array} \right) \vec{u}_{n,\alpha}^{(0)} = E_n^{(0)} \vec{u}_{n,\alpha}^{(1)} + E_n^{(1)} \vec{u}_{n,\alpha}^{(0)}$$

$$\therefore \underbrace{[H']_{N_n \times N_n}} \vec{\chi}_\alpha = E_n^{(1)} \vec{\chi}_\alpha$$

$$\langle n, \alpha | \hat{H}' | n, \beta \rangle \quad \dots \alpha, \beta = 1, \dots, N_n$$

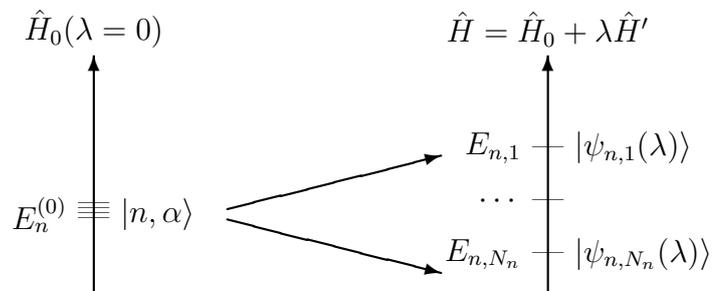
部分行列

よって

$\vec{\chi}_\alpha$ は $[H']_{N_n \times N_n}$ の固有ベクトル … (ココで初めて $\vec{u}_{n,\alpha}^{(0)}$ が決まる。)
 $E_n^{(1)}$ は $[H']_{N_n \times N_n}$ の固有値

(ただし、 $[H']_{N_n \times N_n}$ の固有値に縮退がないと仮定した。

→ さらに縮退している場合、λ の 2 次、3 次 … で求める。)



$\lambda \rightarrow 0$ のとき戻るのは

$$\begin{aligned} |\psi_{n,\alpha}(\lambda)\rangle &\xrightarrow{\lambda \rightarrow 0} |n, \alpha^{(0)}\rangle = \sum_{\beta} \langle n, \beta | n, \alpha^{(0)} \rangle |n, \beta\rangle \\ &= \sum_{\beta} (\vec{\chi}_{\alpha})_{\beta} |n, \beta\rangle \\ &\text{(一般には } \neq |n, \alpha\rangle) \end{aligned}$$

つまり

$$\vec{u}_{n,\alpha}(\lambda) \xrightarrow{\lambda \rightarrow 0} \vec{u}_{n,\alpha}^{(0)} = \begin{pmatrix} 0 \\ \dots \\ \vec{\chi}_{\alpha} \\ \dots \\ 0 \end{pmatrix}$$

§ 4.1.3 に戻ると

Stark 効果 ($n = 2$) の例では

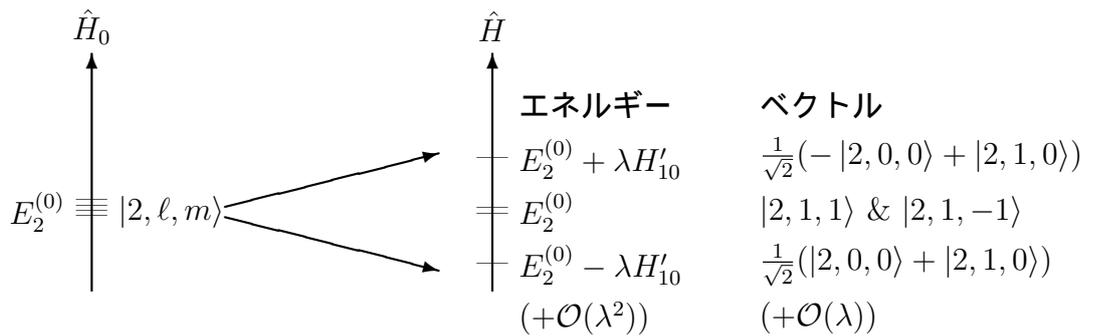
$$\langle \cdot | \hat{H}_0 | \cdot \rangle = \begin{pmatrix} E_1^{(0)} & & & & \\ & E_2^{(0)} & & & \\ & & E_2^{(0)} & & \\ & & & E_2^{(0)} & \\ & & & & E_2^{(0)} \\ & & & & & \dots \end{pmatrix} \begin{matrix} |1, 0, 0\rangle \\ \\ \\ |2, \ell, m\rangle \\ \\ \dots \end{matrix}$$

4×4 行列 $\langle 2, \ell', m | \hat{H}' | 2, \ell, m \rangle$ を対角化すれば良い。

$\lambda \hat{H}' = eEz = eEr \cos \theta \rightarrow$ § 4.1.2 の計算と同様にして
 $\langle 2, \ell', m | \hat{H}' | 2, \ell, m \rangle \propto \delta_{\ell', \ell \pm 1} \delta_{m', m}$

$$[H']_{4 \times 4} = \begin{matrix} & & |2, 0, 0\rangle & |2, 1, 0\rangle & |2, 1, 1\rangle & |2, 1, -1\rangle \\ \langle 2, 0, 0| & & 0 & H'_{01} & 0 & 0 \\ \langle 2, 1, 0| & & H'_{10} & 0 & 0 & 0 \\ \langle 2, 1, 1| & & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \langle 2, 1, -1| & & 0 & 0 & 0 & 0 \end{matrix}$$

具体的に計算すると $\lambda H'_{10} = \lambda H'_{01} = -3eEa_B$ 。 (計算は次ページ)



追加の解説

$$\begin{aligned}
\langle 2, \ell', m | \lambda \hat{H}' | 2, \ell, m \rangle &= eE \langle 2, \ell', m | \hat{z} | 2, \ell, m \rangle \\
&= eE \int d^3x d^3x' \langle 2, \ell', m | x \rangle \langle x | \hat{z} | x' \rangle \langle x' | 2, \ell, m \rangle \\
&= eE \int d^3x d^3x' \cdot \varphi_{2, \ell', m'}^*(\vec{x}) \cdot r \cos \theta \delta^3(\vec{x} - \vec{x}') \cdot \varphi_{2, \ell, m}(\vec{x}') \\
&= eE \int r^2 dr R_{2, \ell'}^*(r) r R_{2, \ell}(r) \int d \cos \theta d\phi Y_{\ell', m'}^*(\theta, \phi) \cos \theta Y_{\ell, m}(\theta, \phi)
\end{aligned}$$

ここで $\int d \cos \theta d\phi$ について、 ϕ 積分から $\delta_{m, m'}$ が得られ、また $Y_{\ell, m}(\theta, \phi)$ は ℓ が偶数 (奇数) のときに $\cos \theta$ の偶関数 (奇関数) なので、 θ 積分は (ℓ, ℓ') が (偶, 奇) or (奇, 偶) のときだけ値を持つ。したがって今の場合、値を持つのは $(\ell, \ell') = (1, 0)$ or $(0, 1)$ 、かつ $(m, m') = (0, 0)$ のときだけ。このとき

$$\begin{aligned}
&\int d \cos \theta d\phi Y_{0, 0}^*(\theta, \phi) \cos \theta Y_{1, 0}(\theta, \phi) \\
&= \int d \cos \theta d\phi Y_{1, 0}^*(\theta, \phi) \cos \theta Y_{0, 0}(\theta, \phi) = \int d \cos \theta d\phi \cdot \sqrt{\frac{1}{4\pi}} \cdot \cos \theta \cdot \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta = \sqrt{\frac{1}{3}}
\end{aligned}$$

一方、動径方向は

$$\begin{aligned}
&\int r^2 dr R_{2, 1}^*(r) r R_{2, 0}(r) \\
&= \int r^2 dr R_{2, 0}^*(r) r R_{2, 1}(r) = \int r^2 dr \tilde{R}_{2, 0}^*\left(\frac{r}{a_B}\right) r \tilde{R}_{2, 1}\left(\frac{r}{a_B}\right) \\
&= a_B^4 \int x^2 dx \cdot \tilde{R}_{2, 0}^*(x) \cdot x \cdot \tilde{R}_{2, 1}(x) \\
&= a_B^4 N_{2, 0} N_{2, 1} \int x^2 dx \cdot e^{-x/2} L_2^1(x) \cdot x \cdot e^{-x/2} x L_3^3(x) \\
&= a_B^4 \frac{1}{96\sqrt{3}a_B^3} \int dx \cdot e^{-x} x^4 (2x - 4)(-6) \\
&= -3\sqrt{3}a_B
\end{aligned}$$

よって

$$\langle 2, \ell', m | \lambda \hat{H}' | 2, \ell, m \rangle = \begin{cases} -3eEa_B & \text{for } (\ell, \ell', m, m') = (1, 0, 0, 0), (0, 1, 0, 0) \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}$$

… 追加の解説ここまで

§ 4.1.4 Zeeman 効果とか (6/10、6/17)

§ 3.4 で予告した磁場中の水素原子のハミルトニアン

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \hat{H}_0 && + \hat{H}_{LS} && + \hat{H}_B \\ &= \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(r) && + \xi(r) \hat{\vec{L}} \cdot \hat{\vec{S}} && - \frac{e}{2m} \vec{B} \cdot (\hat{\vec{L}} + g\hat{\vec{S}})\end{aligned}$$

を考える。カンタンのため

▶ $\xi = \text{const.}$

▶ z 方向に磁場、かつ $g = 2.0023 \dots \simeq 2$ と近似。

$$\rightarrow H_B = \frac{e}{2m} B_z (\hat{L}_z + 2\hat{S}_z)$$

とする。

固有値 (エネルギー) を摂動で求めたい。 $\iff \langle \cdot | \hat{H} | \cdot \rangle$ の対角化。

case 1. 弱磁場

(1) $\hat{H}_0 + \hat{H}_{LS}$ を対角化 \rightarrow (2) \hat{H}_B で摂動 (Zeeman 効果)

case 2. 強磁場

(1) $\hat{H}_0 + \hat{H}_B$ を対角化 \rightarrow (2) \hat{H}_{LS} で摂動 (Paschen-Back 効果)

case 3. 厳密解

フルの \hat{H} を対角化出来る場合もある。(例: $\ell = 1, s = 1/2$)

▶ 完全系は??

$$\underbrace{\hat{H}_0, \hat{L}^2, \hat{S}^2, \hat{L}_z, \hat{S}_z}_{\text{可換}} \text{ の同時固有ベクトル } |n, \ell, s, \ell_z, s_z\rangle$$

$$\text{ 又は } \underbrace{\hat{H}_0, \hat{L}^2, \hat{S}^2, \hat{J}^2, \hat{J}_z}_{\text{可換}} \text{ の同時固有ベクトル } |n, \ell, s, J, M\rangle$$

▶ 注： $\hat{H}_0, \hat{H}_{LS}, \hat{H}_B$ は全て $\hat{H}_0, \hat{L}^2, \hat{S}^2$ と可換。したがって

$$\langle n, \ell, s, \cdot, \cdot | \hat{H} | n', \ell', s', \cdot, \cdot \rangle \propto \delta_{n'n} \delta_{\ell\ell'} \delta_{s's} \quad \text{---}(\star)$$

$$= \begin{pmatrix} \cdots & & & & \\ \cdots & & & & \\ \hline & \cdots & & & \\ & \cdots & & & \\ \hline & & \cdots & & \\ & & \cdots & & \\ \hline & & & \cdots & \\ & & & \cdots & \end{pmatrix} \begin{matrix} (n, \ell, s) = (1, 0, 1/2) \\ (n, \ell, s) = (2, 0, 1/2) \\ (n, \ell, s) = (2, 1, 1/2) \\ \dots \end{matrix}$$

n, ℓ, s に対してブロック対角。

→ 以下では特定の n, ℓ, s に固定して、 \hat{H} を対角化する。

(注： $\xi = \xi(r)$ のときは、 \hat{H}_0 と \hat{H}_{LS} が可換でないので $\langle n', \dots | \hat{H}_{LS} | n, \dots \rangle$ が $n' \neq n$ で値を持つ。この場合は n に関して対角化が必要。)

(\star) を示すには例えば

$$\begin{aligned} 0 &= \langle n \cdots | [\hat{H}, \hat{H}_0] | n' \cdots \rangle \\ &= \langle n \cdots | \hat{H} \hat{H}_0 - \hat{H}_0 \hat{H} | n' \cdots \rangle \\ &= (n' - n) \langle n \cdots | \hat{H} | n' \cdots \rangle \end{aligned}$$

\hat{L}^2, \hat{S}^2 も同様。

case 1. 弱磁場

step (1) まずは $B \rightarrow 0$ として、 $\hat{H}_0 + \hat{H}_{LS}$ を対角化

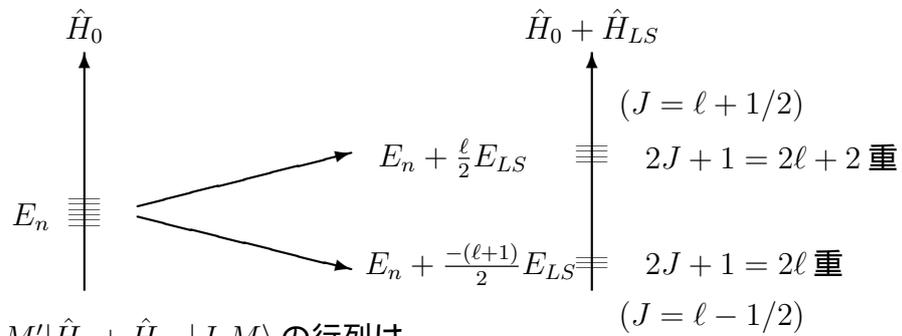
$$\hat{H}_{LS} = \xi \hat{\vec{L}} \cdot \hat{\vec{S}} = \frac{1}{2} \xi (\hat{J}^2 - \hat{L}^2 - \hat{S}^2)$$

$\underbrace{|n, \ell, s\rangle}_{\text{略}}, \underbrace{|J\rangle}_{\hat{J}^2}, \underbrace{|M\rangle}_{\hat{J}_z}$ が良いベース

$$(\hat{H}_0 + \hat{H}_{LS}) |J, M\rangle = \left(E_n + \frac{1}{2} \underbrace{\xi \hbar^2}_{E_{LS}} [J(J+1) - \ell(\ell+1) - s(s+1)] \right) |J, M\rangle$$

▶ 以下 $s = 1/2, \ell \geq 1$ の場合を考える。 $\rightarrow J = \ell \pm \frac{1}{2}$

$$\begin{aligned} (\hat{H}_0 + \hat{H}_{LS}) \left| J = \ell + \frac{1}{2}, M \right\rangle &= \left(E_n + \frac{\ell}{2} E_{LS} \right) \left| J = \ell + \frac{1}{2}, M \right\rangle \\ (\hat{H}_0 + \hat{H}_{LS}) \left| J = \ell - \frac{1}{2}, M \right\rangle &= \left(E_n + \frac{-(\ell+1)}{2} E_{LS} \right) \left| J = \ell - \frac{1}{2}, M \right\rangle \end{aligned}$$



$\langle J', M' | \hat{H}_0 + \hat{H}_{LS} | J, M \rangle$ の行列は

$$E_n \mathbf{1}_{(4\ell+2) \times (4\ell+2)} + \left(\begin{array}{c|c} \frac{\ell}{2} E_{LS} \mathbf{1}_{(2\ell+2) \times (2\ell+2)} & \\ \hline & \frac{-(\ell+1)}{2} E_{LS} \mathbf{1}_{2\ell \times 2\ell} \end{array} \right) \begin{array}{l} J = \ell + \frac{1}{2} \\ J = \ell - \frac{1}{2} \end{array}$$

まだコレは摂動する前。

step (2) 部分行列を \hat{H}_B で摂動

$$\begin{aligned}\hat{H}_B &= \frac{eB_z}{2m}(\hat{L}_z + 2\hat{S}_z) \\ &= \frac{eB_z}{2m}(\hat{J}_z + \hat{S}_z)\end{aligned}$$

▶ \hat{J}_z の部分行列要素は

$$\langle J, M' | \hat{J}_z | J, M \rangle = M\hbar\delta_{MM'}$$

▶ \hat{S}_z は … まず CG 係数のプリントより

$$\begin{aligned}\left| J = \ell \pm \frac{1}{2}, M \right\rangle &= \pm \sqrt{\frac{\ell \pm M + 1/2}{2\ell + 1}} \left| \ell_z = M - \frac{1}{2}, s_z = \frac{1}{2} \right\rangle \\ &+ \sqrt{\frac{\ell \mp M + 1/2}{2\ell + 1}} \left| \ell_z = M + \frac{1}{2}, s_z = -\frac{1}{2} \right\rangle\end{aligned}$$

よって部分行列要素は

$$\begin{aligned}\langle J, M' | \hat{S}_z | J, M \rangle &= \left[\left(\frac{\ell \pm M + 1/2}{2\ell + 1} \right) \left(+\frac{1}{2}\hbar \right) + \left(\frac{\ell \mp M + 1/2}{2\ell + 1} \right) \left(-\frac{1}{2}\hbar \right) \right] \delta_{MM'} \\ &= \pm \frac{1}{2\ell + 1} M\hbar\delta_{MM'}\end{aligned}$$

▶ よって \hat{H}_B の部分行列要素は

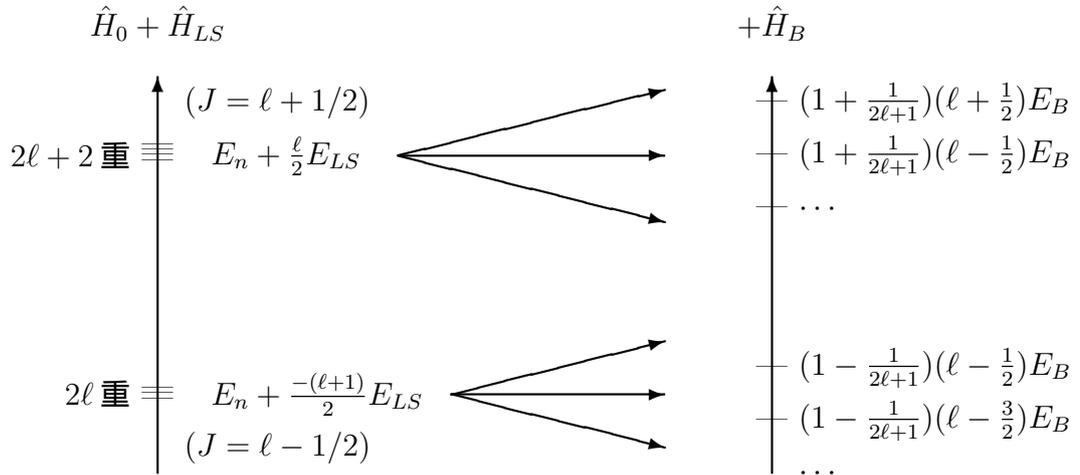
$$\langle J, M' | \hat{H}_B | J, M \rangle = \left(1 \pm \frac{1}{2\ell + 1} \right) M \underbrace{\frac{e\hbar B_z}{2m}}_{E_B} \delta_{MM'}$$

(*) 一般のスピンするとき、ココが

$$g_j = 1 + \frac{J(J+1) - \ell(\ell+1) + s(s+1)}{2J(J+1)} \quad \text{となる。 (Lande の g-factor)}$$

$s \neq 0$ のときのみ $g_j \neq 1$ 。

▶ 対角行列なので対角化の必要ナシ。



▶

$s = 0$ なら	$J = \ell$	→	$(2\ell + 1)$ 個に分かれる。正常ゼーマン効果
$s = 1/2$ なら	$J = \ell \pm \frac{1}{2}$	→	$2(2\ell + 1)$ 個に分かれる。 <div style="font-size: 3em; margin: 0 10px;">}</div> $(2s + 1) \times (2\ell + 1)$ 個に。 <div style="text-align: center; margin-top: -10px;"> $2s + 1$ <small>偶数</small> </div>
一般に $s = \frac{\text{奇数}}{2}$	$J = \begin{cases} \ell + s \\ \dots \\ \ell - s \end{cases}$	→	

step (2) \hat{H}_{LS} で摂動

$$\xi \hat{\vec{L}} \cdot \hat{\vec{S}} = \xi \left(\hat{L}_z \hat{S}_z + \frac{1}{2} (\hat{L}_+ \hat{S}_- + \hat{L}_- \hat{S}_+) \right)$$

$\hat{L}_z, \hat{L}_+, \hat{L}_-$ は ℓ_z をせいぜい ± 1 の範囲でしか動かさないのて

$$\langle m-1, \frac{1}{2} | \xi \hat{\vec{L}} \cdot \hat{\vec{S}} | m+1, \frac{1}{2} \rangle = 0$$

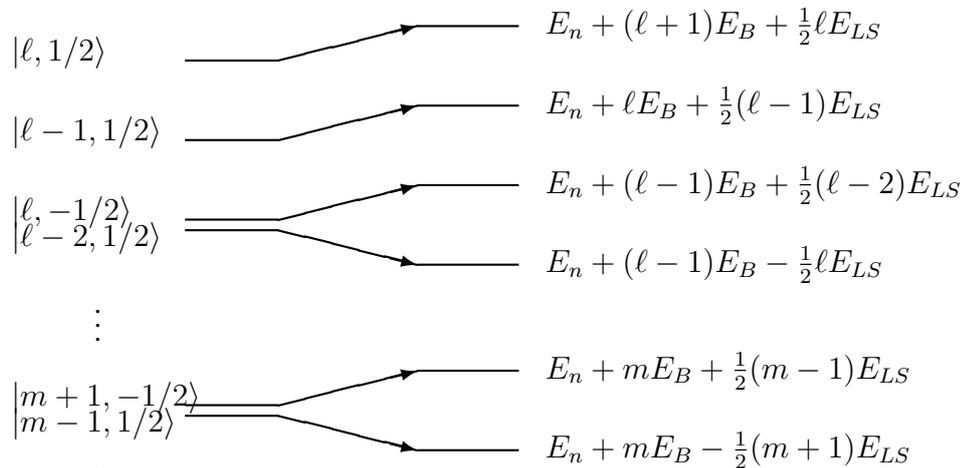
また

$$\langle \ell_z, s_z | \xi \hat{\vec{L}} \cdot \hat{\vec{S}} | m \ell_z, s_z \rangle = \underbrace{\xi \hbar^2}_{E_{LS}} \ell_z s_z$$

よって部分行列に対する摂動は

$$[\hat{H}_{LS}]_{2 \times 2} = \begin{pmatrix} |m+1, -1/2\rangle & |m-1, 1/2\rangle \\ -\frac{1}{2}(m+1) & \frac{1}{2}(m-1) \end{pmatrix} E_{LS}$$

すでに対角化されている。したがって



(6/10 はココまで。)

6/17 ココから

先週は § 4.1.4 の case 1 弱磁場、case 2 強磁場をやりました。

case 3. $\ell = 1, s = 1/2$ の場合の厳密解

$\ell = 1, s = 1/2$ のとき、

$$\text{case 1 より、弱 } B \text{ のとき} \left\{ \begin{array}{l} E_n + \frac{1}{2}E_{LS} + \begin{cases} 2E_B & \cdots (A) \\ \frac{2}{3}E_B & \cdots (B) \\ -\frac{2}{3}E_B & \cdots (C) \\ -2E_B & \cdots (A) \end{cases} \\ E_n - E_{LS} + \begin{cases} \frac{1}{3}E_B & \cdots (B) \\ -\frac{1}{3}E_B & \cdots (C) \end{cases} \end{array} \right.$$

$$\text{case 2 より、強 } B \text{ のとき} \left\{ \begin{array}{l} E_n + 2E_B + \frac{1}{2}E_{LS} \quad \cdots (A) \\ E_n + E_B + 0 \quad \cdots (B) \\ E_n + 0 - \frac{1}{2}E_{LS} \quad \cdots (B)(C) \quad \text{2重。たまたま } \frac{1}{2}(\ell - 2) = -\frac{1}{2}\ell \\ E_n - E_B + 0 \quad \cdots (C) \\ E_n - 2E_B + \frac{1}{2}E_{LS} \quad \cdots (A) \end{array} \right.$$

厳密解は、 $\hat{H}_B = (E_B/\hbar)(\hat{L}_z + 2\hat{S}_z)$ および $\hat{H}_{LS} = (E_{LS}/\hbar^2) \left(\hat{L}_z \hat{S}_z + \frac{1}{2}(\hat{L}_+ \hat{S}_- + \hat{L}_- \hat{S}_+) \right)$ を用いて $\langle \ell'_z, s'_z | \hat{H} | \ell_z, s_z \rangle$ を求めると

$$E_n \mathbf{1}_{6 \times 6} + \begin{pmatrix} |1, 1/2\rangle & |1, -1/2\rangle & |0, 1/2\rangle & |0, -1/2\rangle & |-1, 1/2\rangle & |-1, -1/2\rangle \\ \frac{1}{2}E_{LS} + 2E_B & & & & & \\ & -\frac{1}{2}E_{LS} & \frac{1}{\sqrt{2}}E_{LS} & & & \\ & \frac{1}{\sqrt{2}}E_{LS} & +E_B & & & \\ & & & -E_B & \frac{1}{\sqrt{2}}E_{LS} & \\ & & & \frac{1}{\sqrt{2}}E_{LS} & -\frac{1}{2}E_{LS} & \\ & & & & & \frac{1}{2}E_{LS} - 2E_B \end{pmatrix}$$

固有値は、 $r_B = E_B/E_{LS}$ として

$$\begin{cases} E_n + \frac{1}{2}E_{LS}(1 \pm 4r_B) & \dots (A) \\ E_n + \frac{1}{2}E_{LS} \left(\left(r_B - \frac{1}{2} \right) \pm \sqrt{r_B^2 + r_B + \frac{9}{4}} \right) & \dots (B) \\ E_n + \frac{1}{2}E_{LS} \left(\left(-r_B - \frac{1}{2} \right) \pm \sqrt{r_B^2 - r_B + \frac{9}{4}} \right) & \dots (C) \end{cases}$$

$r_B \ll 1$ として r_B で展開すれば case 1、 $r_B \gg 1$ として r_B^{-1} で展開すれば case 2 の結果が再現出来る。

講義後、前ページの (A)(B)(C) を修正しました。(6/17)

§ 4.2 摂動論 (時間発展) (6/17)

やりたいこと:

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle \quad \text{を解きたい。}$$

以下 § 4.2 では $\hbar = 1$ とする。(あるいは \hat{H}/\hbar を \hat{H} と書く。)

§ 4.2.1 摂動なし



$$\hat{H} = \hat{H}_0$$

解けている ($\hat{H}_0 |n\rangle = E_n |n\rangle$ の $E_n, |n\rangle$ を知っている) とする。

$$i \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = \hat{H}_0 |\psi(t)\rangle$$

の解は

$$|\psi(t)\rangle = e^{-i\hat{H}_0 t} |\psi(0)\rangle \quad \text{—————(1)}$$

$$\left(= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-i\hat{H}_0 t)^k}{k!} |\psi(0)\rangle \quad \dots t \text{ で微分すると確かに } \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = -i\hat{H}_0 |\psi(t)\rangle \right)$$

▶ $\left[\begin{array}{l} \text{固有ベクトル } |n\rangle \text{ で展開してみると} \end{array} \right.$

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n \underbrace{\langle n|\psi(t)\rangle}_{\text{展開係数}} |n\rangle$$

(1) より

$$\begin{aligned} \langle n|\psi(t)\rangle &= \sum_m \langle n| \underbrace{e^{-i\hat{H}_0 t} |m\rangle}_{\rightarrow e^{-iE_m t} |m\rangle} \langle m|\psi(0)\rangle \\ &= e^{-iE_n t} \langle n|\psi(0)\rangle \end{aligned}$$

各展開係数が $e^{-iE_n t}$ で振動するだけ。



§ 4.2.2 摂動あり



$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}'(t) \quad \text{—————(2) 摂動項 / 相互作用項}$$

\hat{H}' は時間によってもよらなくても良い。

\hat{H}_0 の固有ベクトル $|n\rangle$ の言葉で時間発展を追いたい。

▶ 解きたい式は

$$i \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle \quad \text{—————(3)}$$

$$\left(\begin{array}{l} \hat{H}' = const \text{ のとき、そのまま形式的に解くと} \\ |\psi(t)\rangle = e^{-i\hat{H}t} |\psi(0)\rangle \\ \text{しかし } \neq e^{-i\hat{H}'t} e^{-i\hat{H}_0 t} |\psi(0)\rangle \\ = (1 - i\hat{H}'t + \dots) e^{-i\hat{H}_0 t} |\psi(0)\rangle \end{array} \right)$$

▶ $\hat{H}' \rightarrow 0$ のとき § 4.2.1 より

$$|\psi(t)\rangle|_{\hat{H}' \rightarrow 0} = \underbrace{e^{-i\hat{H}_0 t}}_{t \text{ 依存性}} |\psi(0)\rangle$$

だったので、この分をあらかじめ factorize して

$$|\psi(t)\rangle = e^{-i\hat{H}_0 t} |\psi(t)\rangle_I \quad \text{—————(4)}$$

つまり

$$\underbrace{|\psi(t)\rangle_I}_{\text{相互作用表示}} \equiv e^{+i\hat{H}_0 t} |\psi(t)\rangle$$

(2)(4) を解きたい式 (3) に代入すると

$$i \frac{d}{dt} \left(e^{-i\hat{H}_0 t} |\psi(t)\rangle_I \right) = \left(\hat{H}_0 + \hat{H}'(t) \right) \left(e^{-i\hat{H}_0 t} |\psi(t)\rangle_I \right)$$

整理すると

$$i \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle_I = \hat{H}_I(t) |\psi(t)\rangle_I \quad \text{—————(5)}$$

$$\text{where } \hat{H}_I(t) \equiv e^{+i\hat{H}_0 t} \hat{H}'(t) e^{-i\hat{H}_0 t}$$

(注： \hat{H}' が t によらなくても $\hat{H}_I(t)$ は一般に t による。)

(5) の解 $|\psi(t)\rangle_I$ が求めれば、(4) より $|\psi(t)\rangle$ が求まる。

▶ $\left[\begin{array}{l} \psi(t)_I \text{ を } |n\rangle \text{ で展開すると} \\ |\psi(t)\rangle_I = \sum_n \underbrace{\langle n|\psi(t)\rangle_I}_{\text{係数}} |n\rangle \end{array} \right.$

(5) より

$$i \frac{d}{dt} \langle n|\psi(t)\rangle_I = \sum_m \langle n|\hat{H}_I(t)|m\rangle \langle m|\psi(t)\rangle_I \quad \text{—————(5)'}$$

この解 $\langle n|\psi(t)\rangle_I$ が分かれば(4) より

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= \underbrace{\sum_n \langle n|\psi(t)\rangle}_{\text{係数}} |n\rangle \\ &= \langle n|e^{-i\hat{H}_0 t} |\psi(t)\rangle_I \\ &= e^{-iE_n t} \langle n|\psi(t)\rangle_I \end{aligned} \quad \left. \vphantom{\sum_n} \right]$$

▶ さて、(5) あるいは (5)' の解は？

▶ 似た問題として、

$$i \frac{d}{dt} f(t) = h(t) f(t)$$

を考えると、この解は

$$f(t) = e^{-i \int_0^t h(t') dt'} f(0)$$

となる。

▶ では (5) の解は

$$|\psi(t)\rangle_I \stackrel{??? = ???}{=} e^{-i \int_0^t dt' \hat{H}_I(t')} |\psi(0)\rangle_I \quad \text{—————(6)}$$

だろうか。 **No. これは間違い**

▶ CHECK

$$\int_0^t dt' \hat{H}_I(t') = \hat{\phi}(t)$$

とおくと

$$(6) \text{ の右辺} = e^{-i\hat{\phi}(t)} |\psi(0)\rangle_I = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(-i\hat{\phi}(t)\right)^n |\psi(0)\rangle_I$$

$$i \frac{d}{dt} ((6) \text{ の右辺}) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} i \frac{d}{dt} \left(-i\hat{\phi}(t)\right)^n |\psi(0)\rangle_I$$

$$= \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \left[\sum_{k=0}^{n-1} \left(-i\hat{\phi}(t)\right)^k \underbrace{\left(\frac{d}{dt}\hat{\phi}(t)\right)}_{\hat{H}_I(t)} \left(-i\hat{\phi}(t)\right)^{n-k-1} \right] |\psi(0)\rangle_I$$

⇐ × ⇐

[一般には $[\hat{H}_I(t), \hat{\phi}(t)] \neq 0$ なので、 $\hat{H}_I(t)$ を前に出せない]

$$\neq \hat{H}_I(t) \underbrace{\sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} (n-1) \left(-i\hat{\phi}(t)\right)^{n-1}}_{e^{-i\hat{\phi}(t)}} |\psi(0)\rangle_I$$

$$= \hat{H}_I(t) \times ((6) \text{ の右辺})$$

▶ 正解は

$$|\psi(t)\rangle_I = \mathbf{T} \left[e^{-i \int_0^t dt' \hat{H}_I(t')} \right] |\psi(0)\rangle_I \quad \text{—————(7)}$$

T: 「**T**積」「時間順序積」

$$\mathbf{T} \left(\hat{a}(t_1) \hat{b}(t_2) \right) = \begin{cases} \hat{a}(t_1) \hat{b}(t_2) & t_1 > t_2 \\ \hat{b}(t_2) \hat{a}(t_1) & t_2 > t_1 \end{cases}$$

▶ CHECK

$$(7) \text{ の右辺} = \mathbf{T} \left[\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(-i\hat{\phi}(t) \right)^n \right] |\psi(0)\rangle_I$$

$$i \frac{d}{dt} ((7) \text{ の右辺}) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \mathbf{T} \left[\sum_{k=0}^{n-1} \left(-i\hat{\phi}(t) \right)^k \hat{H}_I(t) \left(-i\hat{\phi}(t) \right)^{n-k-1} \right] |\psi(0)\rangle_I$$

←←

$$\left[\hat{\phi}(t) = \int_0^t \hat{H}_I(t') dt' \text{ で } t > t' \text{ なので、} \hat{H}_I(t) \text{ を一番左に出せる} \right]$$

$$= \hat{H}_I(t) \underbrace{\sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \mathbf{T} \left[(n-1) \left(-i\hat{\phi}(t) \right)^{n-1} \right]}_{\mathbf{T}e^{-i\hat{\phi}(t)}} |\psi(0)\rangle_I$$

$$= \hat{H}_I(t) \times ((7) \text{ の右辺})$$

▶ (7) を成分表示すると (←→ (5)') の解

$$\langle n | \psi(t) \rangle_I = \underbrace{\mathbf{T}}_{\text{行列を } t \text{ 順に}} \sum_m \left[\exp \left(-i \int_0^t dt' \left[\tilde{H}_I(t') \right] \right) \right]_{nm} \langle m | \psi(0) \rangle_I$$

$$\left. \text{ただし } \left[\tilde{H}_I(t) \right] \text{ は行列で、} \left[\tilde{H}_I(t) \right]_{k\ell} = \langle k | \hat{H}_I(t) | \ell \rangle. \right]$$

(7) を展開すると

$$\begin{aligned}
 |\psi(t)\rangle_I &= |\psi(0)\rangle_I + \sum_{n=1} \frac{1}{n!} \mathbf{T} \left(-i \int_0^t dt' \hat{H}_I(t') \right)^n |\psi(0)\rangle_I \\
 &= |\psi(0)\rangle_I + \sum_{n=1} \int_0^t dt_n \int_0^{t_n} dt_{n-1} \cdots \int_0^{t_3} dt_2 \int_0^{t_2} dt_1 \hat{H}_I(t_n) \cdots \hat{H}_I(t_1) |\psi(0)\rangle_I \\
 &\quad \text{(とも書ける。(証明略))} \\
 &= |\psi(0)\rangle_I - i \int_0^t dt' \hat{H}_I(t') |\psi(0)\rangle_I + \cdots \quad \text{—————(8)}
 \end{aligned}$$

§ 4.2.3 遷移確率を求めてみると …

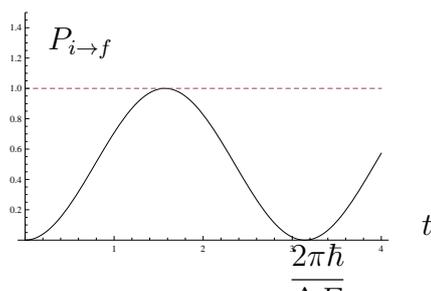
\hat{H}_0 の固有状態 $|i\rangle$ から $|f\rangle$ に移る確率は ($f \neq i$)

$$\begin{aligned}
 P_{i \rightarrow f}(t) &= \left| \underbrace{\langle f | e^{-i\hat{H}t} |i\rangle}_{|\psi(t)\rangle} \right|^2 = |\langle f | \psi(t) \rangle|^2 \\
 \text{((3) より)} &= \left| \underbrace{\langle f | e^{-i\hat{H}_0 t} |\psi(t)_I\rangle}_{e^{iE_f t}} \right|^2 = |\langle f | \psi(t) \rangle_I|^2 \\
 \text{((8) より)} &= \left| \underbrace{\langle f | i \rangle}_{=0} - i \int_0^t dt' \langle f | \underbrace{\hat{H}_I(t')}_{e^{+i\hat{H}_0 t} \hat{H}'(t) e^{-i\hat{H}_0 t}} |i\rangle + \mathcal{O}(H_I)^2 \right|^2 \\
 &= \left| \int_0^t dt' \langle f | \hat{H}'(t') |i\rangle e^{i(E_f - E_i)t'} + \mathcal{O}(H')^2 \right|^2
 \end{aligned}$$

さらに $\hat{H}'(t) = \text{const}$ (for $[0, t]$) とすると積分が実行出来て

$$= \left(\frac{2 \sin(\Delta E t/2)}{\Delta E} \right)^2 |\langle f | \hat{H}' |i\rangle|^2$$

$\left(\frac{2}{\Delta E} \right)^2 |\langle f | \hat{H}' |i\rangle|^2$



2014年度夏学期 量子力学 II (浜口) 第2回レポート: 6/17(火) 出題

- 締切: 2014年 7 / 10 (木) 17:00
- 提出先: 物理教務(理学部1号館208号室) 入口横 レポートボックス
- レポートには科目名、氏名、学籍番号、学年を明記し提出する事。
- 成績は、2回のレポートと期末試験(7/22(火) 予定)の結果を総合して評価する。
レポートは以下の講義のウェブページでも公開している。
<http://www-hep.phys.s.u-tokyo.ac.jp/~hama/lectures/lecture.html>

以下の【問題1】～【問題3】のうち 1つ以上 に答えて提出すること。

【問題1】Wigner-Eckart の定理について

- (1) どのような定理か述べよ。
- (2) 定理を証明せよ。
- (3) 具体例を1つ挙げよ。

【問題2】量子力学におけるビリアル定理について

- (1) どのような定理か述べよ。
- (2) 定理を証明せよ。
- (3) 具体例を1つ挙げよ。

【問題3】ハミルトニアンエネルギー固有値を求める摂動の問題を考え、
エネルギー固有値を摂動の2次まで求めよ。

以上

§ 4.3 準古典近似 (WKB 近似) (7/1 ~)

§ 4.3.1 WKB 近似

やりたいこと

1次元の Schrödinger eq. (x 表示、定常状態)

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right) \varphi(x) = E\varphi(x) \quad \text{———— (1)}$$

を

$$\begin{aligned} \varphi(x) &= e^{\frac{i}{\hbar}S(x)} \\ S(x) &= S_0(x) + \hbar S_1(x) + \hbar^2 S_2(x) \cdots \end{aligned}$$

と置いて解きたい。

▶ まずは代入してみる

$$\begin{aligned} \left(\frac{1}{2m} (S'(x))^2 - \frac{i\hbar}{2m} S''(x) + V(x) - E\right) e^{\frac{i}{\hbar}S(x)} &= 0 \\ \therefore (S'(x))^2 - 2m(E - V(x)) - i\hbar S''(x) &= 0 \quad \text{———— (1)'} \end{aligned}$$

ここまでは元の Schrödinger eq. (1) と同値。

▶ これを

$$\underbrace{S(x) = S_0(x) + \hbar S_1(x) + \hbar^2 S_2(x) \cdots}_{\text{WKB 近似}} \quad \text{———— (2)}$$

として解く。

Comments

1. $S(x) \rightarrow S(x) + const$ としても解なので、 $S_0(x), S_1(x), \dots$ の const. term に意味はない
2. $\hbar = \text{定数}$ なのに \hbar 展開って何だ? (→ 後述)
3. $S'_0(x)$ は ($E > V(x)$ のとき) 古典解の運動量 $p(x)$ (→ 後述)

▶ (2) を (1)' に代入すると

$$\hbar^0 : (S'_0)^2 = 2m(E - V(x)) \quad \iff \text{古典解}$$

$$\hbar^1 : 2S'_0 S'_1 - iS''_0 = 0 \quad \dots \text{ここまでが WKB 近似}$$

$$\hbar^2 : 2S'_0 S'_2 + (S'_1)^2 - iS''_1 = 0$$

...

$$\text{解は } S'_0(x) = \begin{cases} \pm p(x) \equiv \pm \sqrt{2m(E - V(x))} & \text{for } E > V(x) \\ \pm i\kappa(x) \equiv \pm i\sqrt{2m(V(x) - E)} & \text{for } E < V(x) \end{cases}$$

$$S_1(x)' = \frac{i}{2} \frac{S''_0}{S'_0} = \frac{i}{2} (\ln S'_0)' \quad \text{————— (3)}$$

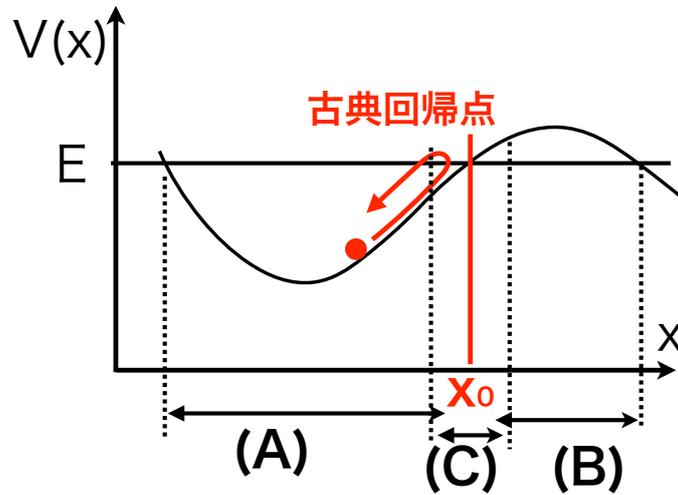
$$\therefore iS_1(x) = -\frac{1}{2} (\ln S'_0)' + \text{const}$$

$$e^{iS_1(x)} = \frac{1}{\sqrt{S'_0(x)}} \times \text{const}$$

$$\text{よって } \varphi(x) = e^{\frac{i}{\hbar}(S_0(x) + \hbar S_1(x) + \hbar^2 S_2(x) \dots)}$$

$$\simeq \frac{1}{\sqrt{S'_0(x)}} e^{\frac{i}{\hbar} S_0(x) + \hbar S_2(x) \dots}$$

無視



(A): $E > V(x)$ 古典的に許されている領域

$$\varphi(x) \simeq \frac{1}{\sqrt{p(x)}} \left(c_1 e^{-\frac{i}{\hbar} \int^x dx' p(x')} + c_2 e^{\frac{i}{\hbar} \int^x dx' p(x')} \right)$$

▶ 古典的な運動における運動量を p_{cl} とおくと

$$E = \frac{p_{cl}^2}{2m} + V(x) \rightarrow p_{cl}(x) = \pm \sqrt{2m(E - V(x))}$$

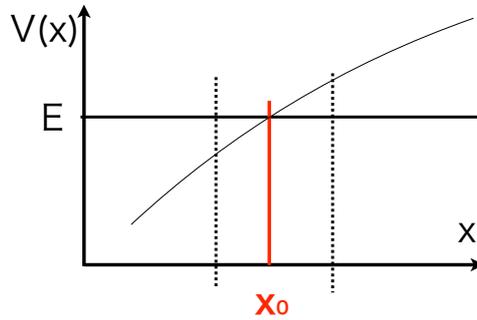
これは $S'_0(x) = \pm p(x)$ に他ならない。

WKB 近似による
Schrödinger eq. の解

(B): $E < V(x)$

$$\varphi(x) \simeq \frac{1}{\sqrt{\kappa(x)}} \left(c'_1 e^{-\frac{1}{\hbar} \int^x dx' \kappa(x')} + c'_2 e^{\frac{1}{\hbar} \int^x dx' \kappa(x')} \right)$$

(C): $E \simeq V(x)$ このとき、(3) より分母の $p(x), \kappa(x) \simeq 0$ 。WKB が使えない。



▶ WKB がよい近似であるための条件

$$S' = S'_0 + \hbar S'_1 + \dots$$

なので

$$|S'_0| \gg \hbar |S'_1|$$

が必要。(3) を用いると、

$$\iff \hbar \ll \frac{4\sqrt{2m}|E - V(x)|^{3/2}}{|V'(x)|} \quad \text{———— (4)}$$

$x = x_0$ の近くで

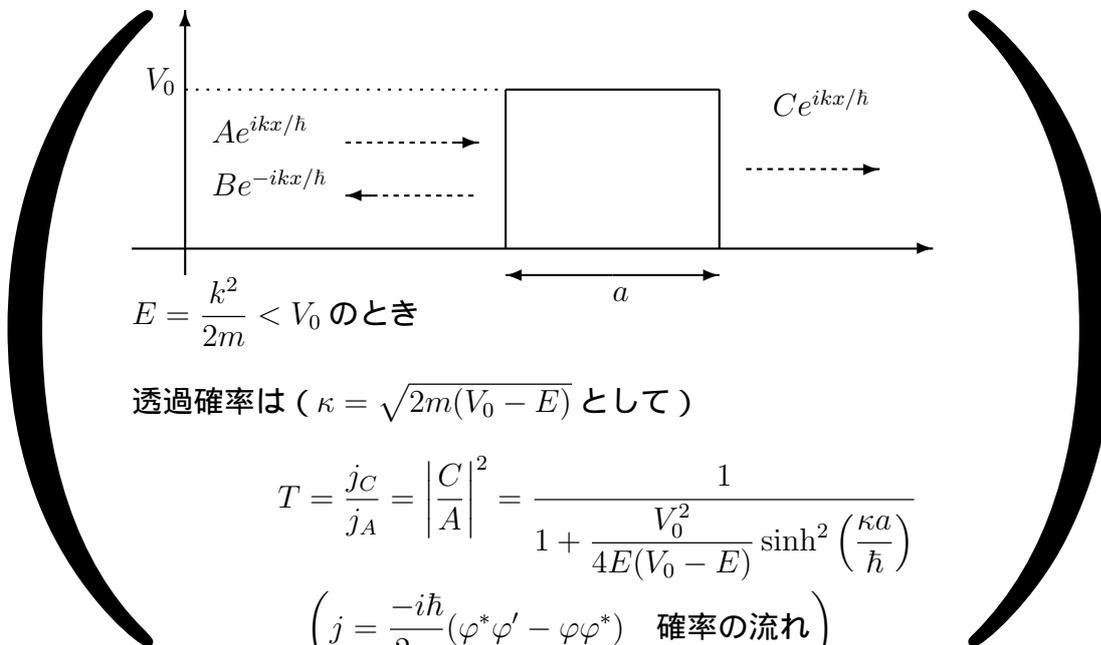
$$V(x) = \underbrace{V(x_0)}_{=E} + V'(x_0)(x - x_0) + \dots$$

と近似すると

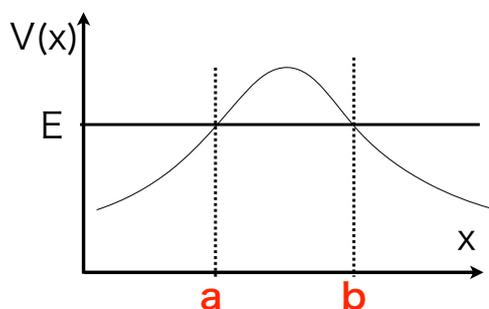
$$(4) \iff |x - x_0| \gg \left(\frac{\hbar^2}{32m|V'(x_0)|} \right)^{1/3}$$

- 古典回帰点から十分離れていることが必要。
- 離れていれば、古典的に許されない $E < V(x)$ の領域でもよい近似になっている。
- x_0 に近いところは Schrödinger eq. に戻ってちゃんと解く。

§ 4.3.2 具体例：トンネル効果



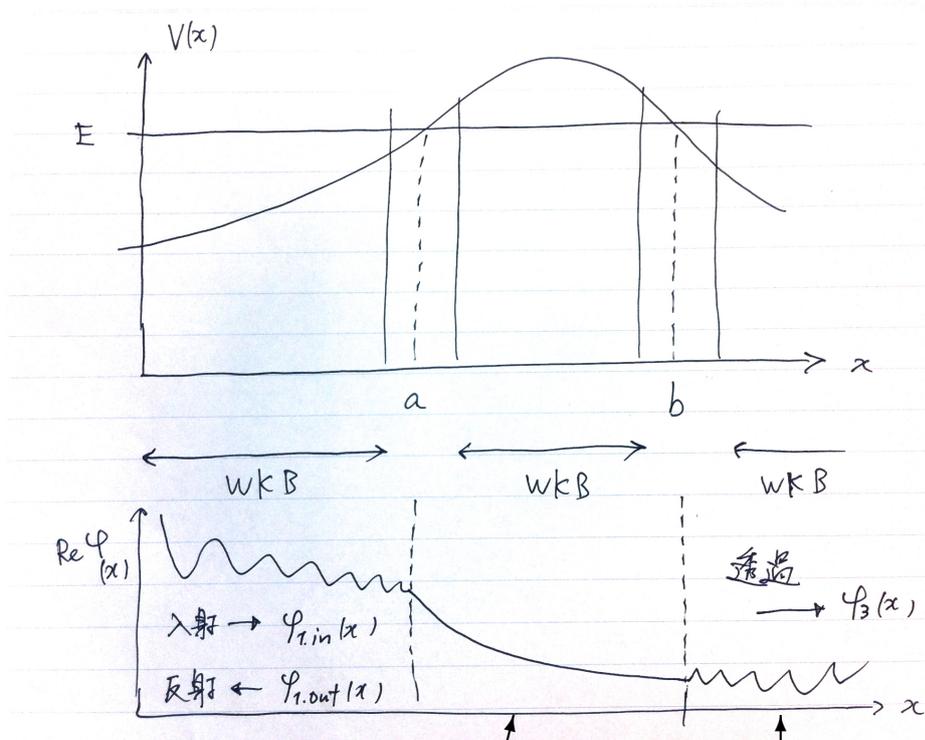
⇒ この一般化



どーなる??…… 答は ……

$$T \simeq \exp \left[-\frac{2}{\hbar} \int_a^b \sqrt{2m(V(x) - E)} dx \right]$$

▶ 計算の方針



$$\begin{aligned} \varphi(x) &= \varphi_{1,in}(x) + \varphi_{1,out}(x) \\ &= \frac{C_{1,in}}{\sqrt{p(x)}} e^{\frac{i}{\hbar} \int^x p(x') dx'} \\ &\quad + \frac{C_{1,out}}{\sqrt{p(x)}} e^{-\frac{i}{\hbar} \int^x p(x') dx'} \end{aligned}$$

$$\varphi(x) \sim \frac{1}{\sqrt{\kappa(x)}} e^{\pm \frac{1}{\hbar} \int^x \kappa(x') dx'}$$

$$\begin{aligned} \varphi(x) &= \varphi_3(x) \\ &= \frac{C_3}{\sqrt{p(x)}} e^{\frac{i}{\hbar} \int^x p(x') dx'} \end{aligned}$$

透過率

$$\begin{aligned} T &= \frac{j_3}{j_{1,in}} = \frac{-\frac{i\hbar}{2m}(\varphi^* \varphi' - \varphi \varphi'^*)_3}{-\frac{i\hbar}{2m}(\varphi^* \varphi' - \varphi \varphi'^*)_{1,in}} \\ &= \left| \frac{C_3}{C_{1,in}} \right|^2 = \left| \exp \left[-\frac{1}{\hbar} \int_a^b \sqrt{2m(V(x) - E)} dx \right] \right|^2 \end{aligned}$$

$x \sim a, x \sim b$ のところをうまくつないで比を求める。(以下コレの説明をする。)

▶ (とても) 大雑把な説明

$a < \varphi(x) < b$ での波動関数を

$$\begin{aligned} \varphi(x) &\simeq \varphi_+(x) + \varphi_-(x) \\ &= \frac{C_+}{\sqrt{\kappa(x)}} e^{+\frac{1}{\hbar} \int_a^x \kappa(x') dx'} + \frac{C_-}{\sqrt{\kappa(x)}} e^{-\frac{1}{\hbar} \int_a^x \kappa(x') dx'} \end{aligned}$$

とすると、波動関数の変化は

$$\frac{\varphi(x \sim b)}{\varphi(x \sim a)} \sim \frac{C_+ e^{M/\hbar} + C_- e^{-M/\hbar}}{C_+ + C_-}, \quad \text{where } M = \int_a^b dx \sqrt{2m(V(x) - E)}$$

一方、 $x \sim b$ で進行波 $\varphi \sim e^{(i/\hbar) \int p dx}$ に
つなげるためには

$$\varphi_+(b) \sim \varphi_-(b)$$

(片方だけだと $\varphi \sim e^{(-i/\hbar) \int p dx}$ も出てくる
→ 後でもうちょいちゃんと見る)

よって

$$C_+ e^{M/\hbar} \sim C_- e^{-M/\hbar}$$

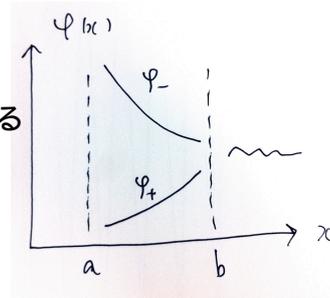
以上より

$$\frac{\varphi(x \sim b)}{\varphi(x \sim a)} \sim \frac{C_- e^{-M/\hbar}}{C_- e^{-2M/\hbar} + C_-} \sim e^{-M/\hbar} \quad (M \gg \hbar \text{を仮定})$$

$$\frac{j_3}{j_{1,in}} \propto \left| \frac{\varphi(x \sim b)}{\varphi(x \sim a)} \right|^2 \sim e^{-2M/\hbar}$$

$a < x < b$ の間に波動関数が $e^{-M/\hbar}$ だけ減衰する、というのが効いている。

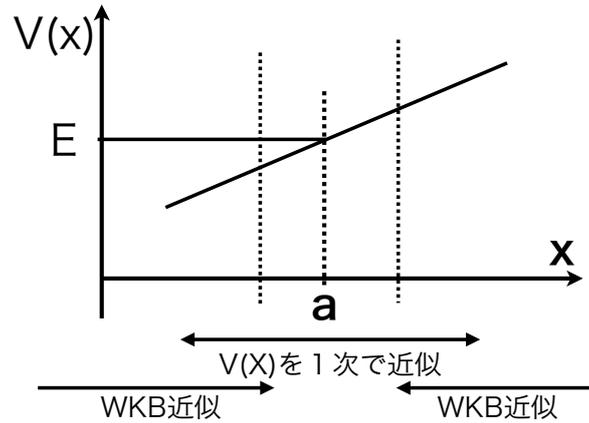
..... 7/1 ココまで



もうちょっとちゃんとしたつなぎ方

§ 4.3.3 接続公式 (7/8~)

▶ まず $x \simeq a$ を考える。($V'(a) > 0$)



(WKB 近似と V の 1 次近似の良い領域に重なりがあることを仮定)

▶

$$V(x) \simeq E + V'(a)(x - a)$$

この近似の下、Schrödinger eq. を解く。

$$\begin{aligned} 0 &= \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) - E \right) \varphi(x) \\ &\simeq \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V'(a)(x - a) \right) \varphi(x) \end{aligned}$$

ここで

$$\lambda \equiv \frac{2mV'(a)}{\hbar^2}, \quad y \equiv \lambda^{1/3}(x - a) \quad \text{—————} \quad (1)$$

とすると

$$\left(\frac{d^2}{dy^2} - y \right) \varphi = 0$$

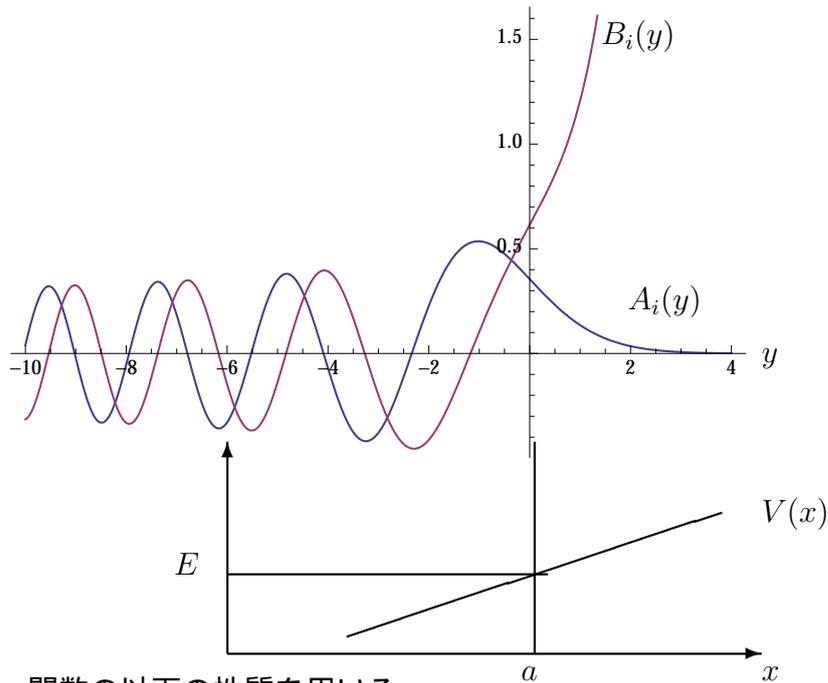
この解は

$$\varphi(y) = C_A \sqrt{\pi} A_i(y) + C_B \sqrt{\pi} B_i(y) \quad \text{—————} \quad (2)$$

積分定数

Airy 関数

($\sqrt{\pi}$ は後のため) (定義などは略)



▶ Airy 関数の以下の性質を用いる

$$\frac{1}{(-y)^{1/4}} \cos \left[\frac{2}{3}(-y)^{3/2} - \frac{\pi}{4} \right] \xrightarrow{y \rightarrow -\infty} \sqrt{\pi} A_i(x) \quad y \rightarrow \infty \rightarrow \frac{1}{2y^{1/4}} \exp \left[-\frac{2}{3}y^{3/2} \right]$$

$$\frac{1}{(-y)^{1/4}} \cos \left[\frac{2}{3}(-y)^{3/2} + \frac{\pi}{4} \right] \xrightarrow{y \rightarrow -\infty} \sqrt{\pi} B_i(x) \quad y \rightarrow \infty \rightarrow \frac{1}{y^{1/4}} \exp \left[+\frac{2}{3}y^{3/2} \right]$$

よって一般解 (2) は $y \rightarrow \pm\infty$ で

$$\varphi(y) \begin{cases} \xrightarrow{y \rightarrow -\infty} \frac{1}{(-y)^{1/4}} \left(C_A \cos \left[\frac{2}{3}(-y)^{3/2} - \frac{\pi}{4} \right] + C_B \cos \left[\frac{2}{3}(-y)^{3/2} + \frac{\pi}{4} \right] \right) \\ \xrightarrow{y \rightarrow +\infty} \frac{1}{y^{1/4}} \left(\frac{C_A}{2} \exp \left[-\frac{2}{3}y^{3/2} \right] + C_B \exp \left[+\frac{2}{3}y^{3/2} \right] \right) \end{cases} \quad (3)$$

▶ (3) は実は WKB 解に接続している！

(1) より

$$\begin{aligned}
 p(x) &= \sqrt{2m(E - V(x))} \simeq \sqrt{2mV'(a)(a - x)} = \hbar\lambda^{1/3}\sqrt{-y} \\
 \kappa(x) &= \sqrt{2m(V(x) - E)} \simeq \sqrt{2mV'(a)(x - a)} = \hbar\lambda^{1/3}\sqrt{y} \\
 L(x) &\equiv \frac{1}{\hbar} \int_a^x p(x') dx' = -\frac{2}{3}(-y)^{3/2} \\
 M(x) &\equiv \frac{1}{\hbar} \int_a^x \kappa(x') dx' = \frac{2}{3}y^{3/2}
 \end{aligned}$$

これらを (3) に代入して整理すると

$$\varphi(x \sim a) \begin{cases} \xrightarrow{x < a} \frac{\hbar^{1/2}\lambda^{1/6}}{\sqrt{p(x)}} \left(C_A \cos \left[L(x) + \frac{\pi}{4} \right] + C_B \cos \left[L(x) - \frac{\pi}{4} \right] \right) \\ \quad = \frac{\hbar^{1/2}\lambda^{1/6}}{\sqrt{p(x)}} \left(\frac{C_A + iC_B}{\sqrt{2}(1+i)} e^{-iL(x)} + \frac{iC_A + C_B}{\sqrt{2}(1+i)} e^{+iL(x)} \right) \\ \xrightarrow{x > a} \frac{\hbar^{1/2}\lambda^{1/6}}{\sqrt{\kappa(x)}} \left(\frac{C_A}{2} e^{-M(x)} + C_B e^{+M(x)} \right) \end{cases}$$

これは WKB 近似式に他ならない。

$$C_- = \hbar^{1/2}\lambda^{1/6} \frac{C_A}{2} \quad C_+ = \hbar^{1/2}\lambda^{1/6} C_B$$

とにおいて、以下の接続公式が得られた。

$$\underbrace{\left(\frac{2iC_- + C_+}{\sqrt{2}(1+i)} \right)}_{C_{1,in}} \frac{1}{\sqrt{p(x)}} e^{+iL(x)} + \underbrace{\left(\frac{2C_- + iC_+}{\sqrt{2}(1+i)} \right)}_{C_{1,out}} \frac{1}{\sqrt{p(x)}} e^{-iL(x)}$$

$$\xleftrightarrow{x < a \quad \varphi(x \sim a) \quad x > a} C_- \frac{1}{\sqrt{\kappa(x)}} e^{-M(x)} + C_+ \frac{1}{\sqrt{\kappa(x)}} e^{+M(x)} \quad (4)$$

- ▶ 全く同様にして、 $x \sim b$ ($V'(b) < 0$) での接続公式も得られて (図を描こう)(次のページに追加の計算アリ。)

$$\begin{aligned} & \tilde{C}_- \frac{1}{\sqrt{\kappa(x)}} e^{-\tilde{M}(x)} + \tilde{C}_+ \frac{1}{\sqrt{\kappa(x)}} e^{+\tilde{M}(x)} \quad \begin{array}{c} x < b \\ \longleftarrow \\ \varphi(x \sim b) \\ \longrightarrow \\ x > b \end{array} \\ & \underbrace{\left(\frac{2\tilde{C}_+ + i\tilde{C}_-}{\sqrt{2}(1+i)} \right)}_{C_3} \frac{1}{\sqrt{p(x)}} e^{+i\tilde{L}(x)} + \underbrace{\left(\frac{2i\tilde{C}_+ + \tilde{C}_-}{\sqrt{2}(1+i)} \right)}_{C_{3,out}} \frac{1}{\sqrt{p(x)}} e^{-i\tilde{L}(x)} \quad (5) \\ & C_{3,out} = 0! \end{aligned}$$

ただし $\tilde{L}(x) \equiv \frac{1}{\hbar} \int_b^x p(x') dx'$ $\tilde{M}(x) \equiv \frac{1}{\hbar} \int_b^x \kappa(x') dx'$

- ▶ 式(4)(5)を $a < x < b$ で比べて

$$\begin{aligned} C_- e^{-M(x)} &= \tilde{C}_- e^{-\tilde{M}(x)} \\ C_+ e^{+M(x)} &= \tilde{C}_+ e^{+\tilde{M}(x)} \\ \rightarrow \frac{C_-}{\tilde{C}_-} &= \frac{\tilde{C}_+}{C_+} = e^{M(x) - \tilde{M}(x)} = \exp \left[\frac{1}{\hbar} \int_a^b \kappa(x) dx \right] \equiv e^A \end{aligned}$$

$C_{3,out} = 0$ より

$$2i\tilde{C}_+ + \tilde{C}_- = 0 \quad (\text{2つのモードが同程度})$$

- ▶ 以上より透過率は

$$\begin{aligned} T &= \left| \frac{C_3}{C_{1,in}} \right|^2 = \left| \frac{2\tilde{C}_+ + i\tilde{C}_-}{2i\tilde{C}_- + C_+} \right|^2 \\ &= \left| \frac{4\tilde{C}_+}{4e^A \tilde{C}_+ + e^{-A} \tilde{C}_+} \right|^2 \\ &= \left(\frac{1}{e^A + \frac{1}{4}e^{-A}} \right)^2 \simeq e^{-2A} \end{aligned}$$

§ 4.3.2 で予告した結果が得られた。

追加の計算 … $x \sim b$ ($V'(b) < 0$) での計算も一応書いておきます。

$$V(x) \simeq E + V'(b)(x - b)$$

Schrödinger eq. は

$$0 \simeq \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V'(b)(x - b) \right) \varphi(x)$$

そこで

$$\lambda \equiv \frac{-2mV'(b)}{\hbar^2}, \quad z \equiv \lambda^{1/3}(x - b)$$

とすると

$$\left(\frac{d^2}{dz^2} + z \right) \varphi = 0$$

一般解は

$$\varphi(z) = \tilde{C}_A \sqrt{\pi} A_i(-z) + \tilde{C}_B \sqrt{\pi} B_i(-z)$$

$z \rightarrow \pm\infty$ で

$$\varphi(z) \begin{cases} \xrightarrow{z \rightarrow -\infty} \frac{1}{(-z)^{1/4}} \left(\frac{\tilde{C}_A}{2} \exp \left[-\frac{2}{3}(-z)^{3/2} \right] + \tilde{C}_B \exp \left[+\frac{2}{3}(-z)^{3/2} \right] \right) \\ \xrightarrow{z \rightarrow +\infty} \frac{1}{z^{1/4}} \left(\tilde{C}_A \cos \left[\frac{2}{3}z^{3/2} - \frac{\pi}{4} \right] + \tilde{C}_B \cos \left[\frac{2}{3}z^{3/2} + \frac{\pi}{4} \right] \right) \end{cases}$$

これを

$$\begin{aligned} p(x) &= \sqrt{2m(E - V(x))} \simeq \sqrt{-2mV'(b)(x - b)} = \hbar\lambda^{1/3}\sqrt{z} \\ \kappa(x) &= \sqrt{2m(V(x) - E)} \simeq \sqrt{-2mV'(b)(b - x)} = \hbar\lambda^{1/3}\sqrt{-z} \\ \tilde{L}(x) &\equiv \frac{1}{\hbar} \int_b^x p(x') dx' = \frac{2}{3}z^{3/2} \\ \tilde{M}(x) &\equiv \frac{1}{\hbar} \int_b^x \kappa(x') dx' = -\frac{2}{3}(-z)^{3/2} \end{aligned}$$

を用いて整理すると

$$\varphi(x \sim b) \begin{cases} \xrightarrow{x < b} \frac{\hbar^{1/2}\lambda^{1/6}}{\sqrt{\kappa(x)}} \left(\frac{\tilde{C}_A}{2} e^{+\tilde{M}(x)} + \tilde{C}_B e^{-\tilde{M}(x)} \right) \\ \xrightarrow{x > b} \frac{\hbar^{1/2}\lambda^{1/6}}{\sqrt{p(x)}} \left(\frac{i\tilde{C}_A + \tilde{C}_B}{\sqrt{2}(1+i)} e^{-i\tilde{L}(x)} + \frac{\tilde{C}_A + i\tilde{C}_B}{\sqrt{2}(1+i)} e^{+i\tilde{L}(x)} \right) \end{cases}$$

$\tilde{C}_+ = \hbar^{1/2}\lambda^{1/6}\tilde{C}_A/2$, $\tilde{C}_- = \hbar^{1/2}\lambda^{1/6}\tilde{C}_B$ とおけば (5) 式を得る。

——— 追加の計算ココまで

§ 5 対称性と保存則

§ 5.1 運動量 \mathbf{p} は並進、角運動量 \mathbf{L} は回転の生成子 (~ 7/8)

§ 5.1.1 \vec{p} は並進

$\vec{a} = \text{real}$ のとき、演算子

$$\hat{U}(\vec{a}) = e^{-i\vec{a}\cdot\hat{\mathbf{p}}/\hbar} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{-i\vec{a}\cdot\hat{\mathbf{p}}}{\hbar} \right)^n$$

は座標を \vec{a} だけずらす :

$$\hat{U}(\vec{a}) |\vec{x}\rangle = |\vec{x} + \vec{a}\rangle$$

check

$$\hat{U}(\vec{a}) = e^{\hat{X}} \quad \hat{X} \equiv \frac{-i\vec{a}\cdot\hat{\mathbf{p}}}{\hbar}$$

として

$$[\hat{x}_j, \hat{X}] = \frac{-ia_k}{\hbar} \underbrace{[\hat{x}_j, \hat{p}_k]}_{=i\hbar\delta_{jk}} = a_j$$

$$[\hat{x}_j, \hat{X}^2] = \hat{X} [\hat{x}_j, \hat{X}] + [\hat{x}_j, \hat{X}] \hat{X} = 2a_j \hat{X}$$

$$[\hat{x}_j, \hat{X}^n] = n\hat{X}^{n-1}a_j \text{ (帰納法)}$$

$$\therefore [\hat{x}_j, \hat{U}(\vec{a})] = \hat{U}(\vec{a}) a_j$$

よって

$$\begin{aligned} \hat{x}_j (\hat{U}(\vec{a}) |\vec{x}\rangle) &= \hat{U}(\vec{a}) (\hat{x}_j + a_j) |\vec{x}\rangle \\ &= (x_j + a_j) (\hat{U}(\vec{a}) |\vec{x}\rangle) \end{aligned}$$

よって

$$\hat{U}(\vec{a}) |\vec{x}\rangle \propto |\vec{x} + \vec{a}\rangle$$

規格化は $\dots \hat{U}(\vec{a}) |\vec{x}\rangle = f(\vec{a}) |\vec{x} + \vec{a}\rangle$ とすると

$\hat{U}(\vec{a})^\dagger \hat{U}(\vec{a}) = \mathbf{1}$ 、 $\langle \vec{x} | \vec{x}' \rangle = \delta(\vec{x} - \vec{x}')$ 、 $\hat{U}(\vec{a}) \hat{U}(\vec{b}) = \hat{U}(\vec{a} + \vec{b})$ より

$f(\vec{a}) = \exp(i\vec{k}_0 \cdot \vec{a})$ with $\vec{k}_0 = \text{const.}$ $\hat{\mathbf{p}} \rightarrow \hat{\mathbf{p}} + \vec{a}$ と再定義すると、 $f(\vec{a}) = 1$ 。

§ 5.1.2 \vec{L} は回転

\vec{n} = 単位ベクトル、 θ = real のとき、演算子

$$\hat{U}(\theta\vec{n}) = e^{-i\theta\vec{n}\cdot\hat{L}/\hbar} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} \left(\frac{-i\theta\vec{n}\cdot\hat{L}}{\hbar} \right)^k$$

は座標を \vec{n} 軸周りに角度 θ だけ回転する。

$$\hat{U}(\theta\vec{n})|\vec{x}\rangle = |R(\theta\vec{n})\vec{x}\rangle$$

ただし $R(\theta\vec{n})$ は 3 次元の回転行列。

$\vec{n} = (0, 0, 1)$ (Z 軸回りの回転) の場合で check

$$\hat{U}(\theta\vec{n}) = e^{\hat{Y}} \quad \hat{Y} \equiv \frac{-i\theta\vec{n}\cdot\hat{L}}{\hbar}$$

として

$$[\hat{x}_j, \hat{Y}] = \frac{-i\theta}{\hbar} [\hat{x}_j, \underbrace{\hat{L}_3}_{=\hat{x}_1\hat{p}_2 - \hat{x}_2\hat{p}_1}] = \begin{cases} -\theta\hat{x}_2 & (j=1) \\ \theta\hat{x}_1 & (j=2) \\ 0 & (j=3) \end{cases}$$

$$\left[\begin{pmatrix} \hat{x}_1 \\ \hat{x}_2 \\ \hat{x}_3 \end{pmatrix}, \hat{Y} \right] = \left(\begin{array}{c|c} -\theta & \\ \theta & \\ \hline & 0 \end{array} \right) \begin{pmatrix} \hat{x}_1 \\ \hat{x}_2 \\ \hat{x}_3 \end{pmatrix}$$

行列 (or 演算子) \hat{X}, \hat{Y} に対する公式

$$e^{-\hat{Y}} \hat{X} e^{\hat{Y}} = \hat{X} + [\hat{X}, \hat{Y}] + \frac{1}{2!} [[\hat{X}, \hat{Y}], \hat{Y}] + \dots$$

を用いて

$$e^{-\hat{Y}} \begin{pmatrix} \hat{x}_1 \\ \hat{x}_2 \\ \hat{x}_3 \end{pmatrix} e^{\hat{Y}} = \frac{1}{n!} \left(\begin{array}{c|c} -\theta & \\ \theta & \\ \hline & 0 \end{array} \right)^n \begin{pmatrix} \hat{x}_1 \\ \hat{x}_2 \\ \hat{x}_3 \end{pmatrix} = \underbrace{\left(\begin{array}{cc|c} \cos\theta & -\sin\theta & \\ \sin\theta & \cos\theta & \\ \hline & & 1 \end{array} \right)}_{R(\theta\vec{n})} \begin{pmatrix} \hat{x}_1 \\ \hat{x}_2 \\ \hat{x}_3 \end{pmatrix}$$

$$\therefore \hat{x}_j \hat{U}(\theta\vec{n}) = \hat{U}(\theta\vec{n}) [R(\theta\vec{n})\hat{x}]_j$$

よって

$$\begin{aligned}\hat{x}_j \left(\hat{U}(\theta\vec{n}) |\vec{x}\rangle \right) &= \hat{U}(\theta\vec{n}) [R(\theta\vec{n})\hat{x}]_j |\vec{x}\rangle \\ &= [R(\theta\vec{n})x]_j \left(\hat{U}(\theta\vec{n}) |\vec{x}\rangle \right) \\ \therefore \hat{U}(\theta\vec{n}) |\vec{x}\rangle &\propto |R(\theta\vec{n})\vec{x}\rangle\end{aligned}$$

規格化はさっきと同様、 $\hat{U}^\dagger\hat{U} = 1$ より phase factor を除いて 1 に取れる。

(... 7/8 ココまで)

(... 7/15 ココから)

§ 5.2 ユニタリー演算子とエルミート演算子 (7/15 ~)

\hat{A} がエルミート : $\hat{A}^\dagger = \hat{A}$

\hat{U} がユニタリー : $\hat{U}^\dagger\hat{U} = \hat{U}\hat{U}^\dagger = 1$

\hat{A} がエルミートのとき、

$$e^{i\hat{A}} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} (i\hat{A})^n$$

はユニタリー。

§ 5.3 対称性と保存則

まとめ

$$\begin{aligned}
 & [\hat{H}, \hat{A}] = 0 \\
 \iff & e^{i\hat{H}t/\hbar} \hat{A} e^{-i\hat{H}t/\hbar} = \hat{A} \quad \text{保存則 § 5.4} \\
 \iff & e^{i\alpha\hat{A}} \hat{H} e^{-i\alpha\hat{A}} = \hat{H} \quad \text{対称性 § 5.5}
 \end{aligned}$$

例 1: $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m}$ のとき

$$\begin{aligned}
 & [\hat{H}, \hat{p}_k] = 0 \\
 \iff & e^{i\hat{H}t/\hbar} \hat{p}_k e^{-i\hat{H}t/\hbar} = \hat{p}_k \quad \text{運動量保存 § 5.4} \\
 \iff & e^{i\vec{a}\cdot\hat{p}} \hat{H} e^{-i\vec{a}\cdot\hat{p}} = \hat{H} \quad \text{並進対称性 § 5.5} \\
 & (\text{§ 5.1.1: } p \text{ は並進})
 \end{aligned}$$

例 2: $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \underbrace{V(r)}_{\text{球対称}}$ のとき

$$\begin{aligned}
 & [\hat{H}, \hat{L}_k] = 0 \\
 \iff & e^{i\hat{H}t/\hbar} \hat{L}_k e^{-i\hat{H}t/\hbar} = \hat{L}_k \quad \text{角運動量保存 § 5.4} \\
 \iff & e^{i\vec{\theta}\cdot\hat{L}} \hat{H} e^{-i\vec{\theta}\cdot\hat{L}} = \hat{H} \quad \text{回転対称性 § 5.5} \\
 & (\text{§ 5.1.2: } L \text{ は回転})
 \end{aligned}$$

§ 5.4 保存量

保存量 A がある : 対応する演算子 \hat{A} に対して

$$[\hat{H}, \hat{A}] = 0 \quad \text{—————(1)}$$

▶ Schrödinger 描像

Schrödinger eq. を満たす任意の $|\alpha(t)\rangle, |\beta(t)\rangle$ に対して

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle \alpha(t) | \hat{A} | \beta(t) \rangle &= \underbrace{\left(\frac{d}{dt} \langle \alpha(t) | \right)}_{\frac{1}{-i\hbar} \langle \alpha(t) | \hat{H}} \hat{A} | \beta(t) \rangle + \langle \alpha(t) | \hat{A} \underbrace{\left(\frac{d}{dt} | \beta(t) \rangle \right)}_{\frac{1}{i\hbar} \hat{H} | \beta(t) \rangle} \\ &= \frac{i}{\hbar} \langle \alpha(t) | [\hat{H}, \hat{A}] | \beta(t) \rangle \\ &= 0 \quad [\leftarrow (1)] \quad \dots \hat{A} \text{ の行列要素は time-independent} \end{aligned}$$

特に \hat{A} の期待値 $\langle \psi(t) | \hat{A} | \psi(t) \rangle$ が time-independent.

▶ Heisenberg 描像

$$\hat{A}_H(t) = e^{i\hat{H}t/\hbar} \hat{A} e^{-i\hat{H}t/\hbar} = \hat{A}_H(0) = \hat{A} \quad \dots \text{time-independent}$$

▶ 例

例 1 : $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m}$ のとき $[\hat{H}, \hat{p}] = 0 \implies$ 運動量 \vec{p} が保存

例 2 : $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(r)$ のとき $[\hat{H}, \hat{L}] = 0 \implies$ 角運動量 \vec{L} が保存

§ 5.5 対称性

§ 5.5.1 ユニタリー演算子と対称性

- ▶ \hat{U} : $\hat{U}^\dagger \hat{U} = \hat{U} \hat{U}^\dagger = \mathbf{1}$
 (例: $\hat{U}(a) = e^{i\vec{a} \cdot \hat{p}}$, \vec{a} : 実数)

任意の $|\alpha\rangle$, $|\beta\rangle$ に対して

$$\text{ユニタリー変換} \begin{cases} |\alpha\rangle \rightarrow |\alpha'\rangle = \hat{U} |\alpha\rangle \\ |\beta\rangle \rightarrow |\beta'\rangle = \hat{U} |\beta\rangle \end{cases}$$

$$\langle \alpha' | \beta' \rangle = \langle \alpha | \hat{U}^\dagger \hat{U} | \beta \rangle = \langle \alpha | \beta \rangle$$

- ▶ 「系に対称性がある」

$$\longleftrightarrow \text{ユニタリー変換 } \hat{U} \text{ があって、} [\hat{H}, \hat{U}] = 0 \iff \hat{U} \hat{H} \hat{U}^\dagger = \hat{H}$$

このとき

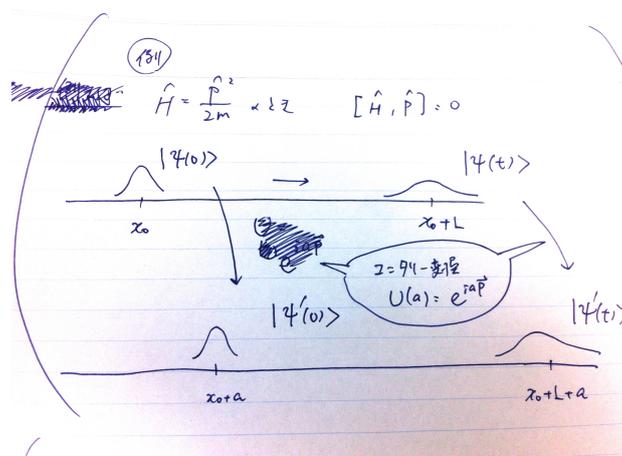
$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle \quad \text{なら}$$

$$i\hbar \frac{d}{dt} (\hat{U} |\psi(t)\rangle) = \hat{U} \hat{H} |\psi(t)\rangle = \hat{H} (\hat{U} |\psi(t)\rangle) \quad (\hat{U} |\psi(t)\rangle \text{ も } |\psi(t)\rangle \text{ と同じ時間発展})$$

あるいは

$$\langle \beta' | e^{-i\hat{H}t/\hbar} | \alpha' \rangle = \langle \beta | \hat{U}^\dagger e^{-i\hat{H}t/\hbar} \hat{U} | \alpha \rangle = \langle \beta | e^{-i\hat{H}t/\hbar} | \alpha \rangle$$

($|\alpha\rangle \rightarrow |\beta\rangle$ の振幅と $|\alpha'\rangle \rightarrow |\beta'\rangle$ の振幅が同じ)



▶ 連続と離散

H	\hat{U}	
$H = p^2/2m$	$\hat{U}(a) = e^{ia\hat{p}}$	並進 (連続対称性)
$H = p^2/2m + V(x^2)$	$\hat{U} x\rangle = -x\rangle$	パリティ (離散対称性)

▶ \hat{H} を不変にするユニタリー変換 \hat{U} の集合は群をなす。

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{積: } \hat{U}_1\hat{U}_2 \\ \text{逆: } \hat{U}^{-1} = \hat{U}^\dagger \\ \text{単位元: } 1 \end{array} \right.$$

§ 5.5.2 連続対称性の生成子と保存量

$$\hat{U} : \begin{cases} \hat{U}^\dagger \hat{U} = \mathbf{1} \\ [\hat{H}, \hat{U}] = 0 \end{cases}$$

- ▶ \hat{U} が単位元の近くで N 個の実パラメータで展開出来るとする。

$$\hat{U}(\epsilon) = \mathbf{1} + i \sum_{a=1}^N \epsilon_a \hat{T}_a + \mathcal{O}(\epsilon^2)$$

\hat{T}_a : 生成子

- ▶ $\hat{U}^\dagger \hat{U} = \mathbf{1}$ より $(1 - i\epsilon_a \hat{T}_a^\dagger)(1 + i\epsilon_a \hat{T}_a) = \mathbf{1} + \mathcal{O}(\epsilon^2)$

よって

$\hat{T}_a^\dagger = \hat{T}_a$: エルミート。

- ▶ $[\hat{H}, \hat{U}] = 0$ より

$[\hat{H}, \hat{T}_a] = 0$: \hat{T}_a は何か保存量を表す！

- ▶ $\hat{U}(\epsilon_2)^\dagger \hat{U}(\epsilon_1)^\dagger \hat{U}(\epsilon_2) \hat{U}(\epsilon_1) = \hat{U}(f(\epsilon_1, \epsilon_2))$ として展開すると

$$[\hat{T}_a, \hat{T}_b] = i \sum_{c=1}^N f_{ab}^c \hat{T}_c$$

実係数「構造定数」

も示せる。

- ▶ 例 :

$$\hat{U}(a) = e^{-ia\hat{p}/\hbar} \quad (\text{並進})$$

$$\hat{U}(\vec{\theta}) = e^{-i\vec{\theta} \cdot \hat{L}/\hbar} \quad (\text{回転})$$

$$\hat{U}(\epsilon) = \mathbf{1} - i\epsilon\hat{p}/\hbar + \dots$$

$$\hat{U}(\vec{\epsilon}) = \mathbf{1} - i\vec{\epsilon} \cdot \hat{L}/\hbar + \dots$$

生成子 : \hat{p}

生成子 : \hat{L}

$$f_{ab}^c = \epsilon_{abc}, \quad \text{SU}(2)$$

おしまい。お疲れさまでした。

§ 6 オマケ

9/2(火)の補講は成績と全く関係ない(もしかすると量子力学ともあまり関係ない?) オマケの講義です。まだ何をやるか決めてません。