

July 9, 2025

# 量子力学 2 講義ノート

諸井健夫

## 参考文献

講義の理解に参考となる教科書

- 量子力学：猪木慶治、川合光（講談社）
- 量子力学：ディラック（岩波書店）
- ファインマン物理学〈5〉量子力学：ファインマン（岩波書店）
- 現代の量子力学：JJ サクライ（吉岡書店）
- ……

# 1 中心力場の Schrödinger 方程式

## 1.1 3次元の Schrödinger 方程式

多少の復習：

- 量子力学における「状態」：Hilbert 空間の「ベクトル」  
 $|\psi(t)\rangle$  (Schrödinger 描像)
- Hilbert 空間の「基底」：互いに可換な演算子の固有状態  
1次元量子力学の時：(例えば) 位置演算子の固有状態に基底をとる  
 $\hat{x}|x\rangle = x|x\rangle$  (注： $\hat{x}$  は Schrödinger 描像の演算子で時間に依らない)  
 $\Rightarrow$  波動関数： $\psi(t, x) = \langle x|\psi(t)\rangle$
- Schrödinger 描像では、状態は Schrödinger 方程式に従って時間発展

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

ハミルトニアンは(多くの場合) 古典論からの類推で決定。

3次元の量子力学(1粒子を扱う)：

- 力学変数(正準変数)： $x, y, z$  (あるいは  $x_i$  with  $i = 1 - 3$ )
- 正準運動量： $p_x, p_y, p_z$  (あるいは  $p_i$  with  $i = 1 - 3$ )

量子力学では、それぞれに対応した演算子がある

- $\hat{x}_i, \hat{p}_i$   
 $\Rightarrow$  交換関係： $[\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\delta_{ij}, [\hat{x}_i, \hat{x}_j] = [\hat{p}_i, \hat{p}_j] = 0$   
 $\Rightarrow$  3つの座標演算子は可換なので、それらの同時固有状態を考えることができる：

$$|x, y, z\rangle \equiv |\vec{x}\rangle, \quad \langle \vec{x}|\vec{x}'\rangle = \delta^{(3)}(\vec{x} - \vec{x}')$$

3次元の量子力学における波動関数：

- $\psi(t, \vec{x}) \equiv \langle \vec{x}|\psi(t)\rangle$

波動関数に対する運動量演算子の作用： $\langle \vec{x}|\hat{p}_i|\psi(t)\rangle = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_i} \langle \vec{x}|\psi(t)\rangle$

ハミルトニアン：

$$H = \frac{1}{2m}(\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2) + V(x, y, z, t)$$

波動関数の従う Schrödinger 方程式

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(t, \vec{x}) = \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(t, \vec{x}) \right] \psi(t, \vec{x})$$

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} = \sum_i \partial_i^2$$

## 1.2 球対称な（時間によらない）ポテンシャル

以下、 $V = V(r)$  with  $r \equiv \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$

- ポテンシャルが時間によらないので、エネルギー固有状態の波動関数を考える

$$\psi(t, \vec{x}) = e^{-iEt/\hbar} \varphi(\vec{x})$$

$$\Rightarrow E\varphi(\vec{x}) = \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(r) \right] \varphi(\vec{x})$$

球対称ポテンシャルに対しては、極座標を用いるのが便利：

$$x = r \sin \theta \cos \phi, \quad y = r \sin \theta \sin \phi, \quad z = r \cos \theta.$$

極座標でのラプラシアン

$$\nabla^2 = \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2}.$$

ということで、解くべき方程式：

$$E\varphi(\vec{x}) = \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) + V(r) \right] \varphi(\vec{x}) \quad (1.1)$$

この方程式を、変数分離法を用いて解く：

$$\varphi(\vec{x}) = R(r)Y(\theta, \phi).$$

Eq. (1.1) を  $-(\hbar^2/2m)^{-1}r^2$  倍して整理すると：

$$r \frac{\partial^2}{\partial r^2} r(RY) + \frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} (RY) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial}{\partial \phi^2} (RY) - \frac{2mr^2}{\hbar^2} (V - E)(RY) = 0.$$

$$\Downarrow \quad \times \frac{1}{RY}$$

$$\frac{r}{R} \frac{\partial^2}{\partial r^2} (rR) - \frac{2mr^2}{\hbar^2} (V - E) = -\frac{1}{Y} \left( \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial}{\partial \phi^2} \right) Y \quad (1.2)$$

Eq. (1.2)：

- 左辺： $r$  のみの関数 ( $V$  は中心力ポテンシャル)
  - 右辺： $\theta$  と  $\phi$  のみの関数
- $\Rightarrow$  両辺とも定数 ( $\lambda$  とする)

特に角度部分の満たす方程式：

$$-\left( \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial}{\partial \phi^2} \right) Y = \lambda Y. \quad (1.3)$$

### 1.3 球面調和関数

$Y_{\ell,m}(\theta, \phi)$ ：Eq. (1.3) に従う球面上で定義された関数：

- 全ての  $(\theta, \phi)$  で有界
- 1 値関数 (球面上で)

$Y_{\ell,m}$  を求めるため、以下の演算子を定義：

$$\begin{aligned} \hat{\ell}_1 &= -i(x_2 \partial_3 - x_3 \partial_2) = \frac{1}{\hbar} \hat{L}_1 = \frac{1}{\hbar} (\hat{x}_2 \hat{p}_3 - \hat{x}_3 \hat{p}_2) \\ \hat{\ell}_2 &= -i(x_3 \partial_1 - x_1 \partial_3) \\ \hat{\ell}_3 &= -i(x_1 \partial_2 - x_2 \partial_1) \end{aligned}$$

あるいは： $\hat{\ell}_a = -i\epsilon_{abc}x_b\partial_c$

- $\epsilon_{abc}$ ：完全反対称テンソル

$$\epsilon_{abc} = \begin{cases} +1 & : (a, b, c) = (1, 2, 3), (2, 3, 1), (3, 1, 2) \\ -1 & : (a, b, c) = (2, 1, 3), (1, 3, 2), (3, 2, 1) \\ 0 & : \text{otherwise} \end{cases}$$

- 2つ重複する添字については1-3で和をとる。

極座標では：

$$\begin{aligned}\hat{\ell}_1 &= i \sin \phi \partial_\theta + i \cos \phi \cot \theta \partial_\phi, \\ \hat{\ell}_2 &= -i \cos \phi \partial_\theta + i \sin \phi \cot \theta \partial_\phi, \\ \hat{\ell}_3 &= -i \partial_\phi. \\ \Rightarrow \hat{\ell}^2 &\equiv \hat{\ell}_1^2 + \hat{\ell}_2^2 + \hat{\ell}_3^2 = - \left( \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial}{\partial \phi^2} \right)\end{aligned}$$

ちなみに3次元ラプラシアン：

$$\nabla^2 = \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r - \frac{\hat{\ell}^2}{r^2}.$$

交換関係：

$$\begin{aligned}[\hat{\ell}_1, \hat{\ell}_2] f(\theta, \phi) &= (\hat{\ell}_1 \hat{\ell}_2 - \hat{\ell}_2 \hat{\ell}_1) f(\theta, \phi) \\ &= (-i)^2 [(x_2 \partial_3 - x_3 \partial_2) \{ (x_3 \partial_1 - x_1 \partial_3) f \} - (x_3 \partial_1 - x_1 \partial_3) \{ (x_2 \partial_3 - x_3 \partial_2) f \}] \\ &= -(x_2 \partial_1 - x_1 \partial_2) f = i \hat{\ell}_3 f\end{aligned}$$

従って：

$$\begin{aligned}[\hat{\ell}_1, \hat{\ell}_2] &= i \hat{\ell}_3, \quad [\hat{\ell}_2, \hat{\ell}_3] = i \hat{\ell}_1, \quad [\hat{\ell}_3, \hat{\ell}_1] = i \hat{\ell}_2. \\ \Rightarrow [\hat{\ell}^2, \hat{\ell}_1] &= [\hat{\ell}^2, \hat{\ell}_2] = [\hat{\ell}^2, \hat{\ell}_3] = 0\end{aligned}$$

可換な微分演算子のセットとして  $\hat{\ell}^2$  と  $\hat{\ell}_3$  を選ぶ：

$\Rightarrow \hat{\ell}^2$  と  $\hat{\ell}_3$  の同時固有関数が存在（球面調和関数  $Y_{\ell, m}$ ）

$$\hat{\ell}^2 Y_{\ell, m} = \ell(\ell + 1) Y_{\ell, m}, \quad \Leftrightarrow \quad \lambda \rightarrow \ell(\ell + 1) \quad (1.4)$$

$$\hat{\ell}_3 Y_{\ell, m} = m Y_{\ell, m}, \quad (1.5)$$

まず Eq. (1.5) から：

$$-i \frac{\partial}{\partial \phi} Y_{\ell, m} = m Y_{\ell, m}. \quad \Rightarrow \quad Y_{\ell, m} = \Theta_{\ell, m}(\theta) e^{im\phi}.$$

$Y_{\ell, m}$  は1値関数： $Y_{\ell, m}(\theta, \phi + 2\pi) = Y_{\ell, m}(\theta, \phi)$

$\Rightarrow m$  は整数

続いて  $\theta$  依存性：

$$\begin{aligned}
& - \left( \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} \right) Y_{\ell, m} = \ell(\ell + 1) Y_{\ell, m}. \\
& \Downarrow \quad \mu \equiv \cos \theta, \frac{d}{d\mu} = -\frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} \\
& - \frac{d}{d\theta} (1 - \mu^2) \frac{d\Theta_{\ell, m}}{d\mu} - \ell(\ell + 1) \Theta_{\ell, m} + \frac{m^2}{1 - \mu^2} \Theta_{\ell, m} = 0.
\end{aligned}$$

ちょっと変形して：

$$(1 - \mu^2) \frac{d^2 \Theta_{\ell, m}}{d\mu^2} - 2\mu \frac{d\Theta_{\ell, m}}{d\mu} + \left[ \ell(\ell + 1) - \frac{m^2}{1 - \mu^2} \right] \Theta_{\ell, m} = 0.$$

従って、 $\Theta_{\ell, m}$  はルジャンドルの陪関数と同じ方程式を満たす。

$\Rightarrow$  有界性から  $\ell$  はゼロ以上の整数

コメント： $m = 0$  のときの考察 ( $\ell$  が非負の整数ということに関連して)

$$(1 - \mu^2) \frac{d^2 \Theta_{\ell, 0}}{d\mu^2} - 2\mu \frac{d\Theta_{\ell, 0}}{d\mu} + \ell(\ell + 1) \Theta_{\ell, 0} = 0. \quad (1.6)$$

$\Theta_{\ell, 0}$  を級数展開して求めてみる：

$$\Theta_{\ell, 0}(\mu) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \mu^n. \quad \Rightarrow \quad \Theta'_{\ell, 0} = \sum_n n c_n \mu^{n-1}, \quad \Theta''_{\ell, 0} = \sum_n n(n-1) c_n \mu^{n-2}$$

Eq. (1.6) に上の展開式を代入して：

$$\begin{aligned}
0 &= \sum_n [c_n n(n-1)(\mu^n - \mu^{n-1}) + 2c_n n \mu^n - \ell(\ell+1)\mu^n] \\
&= \sum_n [\{n(n+1) - \ell(\ell+1)\} \mu^n c_n - (n+2)(n+1) c_{n+2}] \mu^n.
\end{aligned}$$

従って： $c_{n+2} = \frac{n(n+1) - \ell(\ell+1)}{(n+2)(n+1)} c_n$

- $c_0$  と  $c_1$  は未定
- $c_n$  ( $n \geq 2$ ) は上の漸化式できまる。

$$\Theta_{\ell, 0} = c_0 \sum_{n'=0}^{\infty} (c_{2n'}/c_0) \mu^{2n'} + c_1 \sum_{n'=0}^{\infty} (c_{2n'+1}/c_1) \mu^{2n'+1}$$

$n \rightarrow \infty$  とすると、 $(c_{n+2}/c_n) \rightarrow 1$

$$\Theta_{\ell,0} \sim c_0 \sum_{n'} 1 + c_1 \sum_{n'} 1 \sim \infty \quad (?)$$

$\ell$  が非負の整数なら、このような振る舞いを防げる

$$\Leftrightarrow c_{\ell+2} = \left[ \frac{n(n+1) - \ell(\ell+1)}{(n+2)(n+1)} \right]_{n \rightarrow \ell} c_\ell = 0$$

まとめると：

$$Y_{\ell,m}(\theta, \phi) = (-1)^m \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi} \frac{(\ell-1)!}{(\ell+1)!}} P_\ell^m(\cos \theta) e^{im\phi}.$$

$$Y_{\ell,-m}(\theta, \phi) = (-1)^m Y_{\ell,m}(\theta, \phi)$$

$$P_\ell^m(\mu) = \frac{1}{2^\ell \ell!} (1 - \mu^2)^{m/2} \frac{d^{\ell+m}}{d\mu^{\ell+m}} (\mu^2 - 1)^\ell$$

軌道角運動量演算子の固有値の満たすべき条件：

- $\hat{\ell}^2$  の固有値： $\ell(\ell+1)$ 、ただし  $\ell$  は非負の整数
- $\hat{\ell}_3$  の固有値： $m$  ( $-\ell \leq m \leq \ell$  の整数)

$m$  の値の範囲はここでは説明していないが、 $\hat{\ell}^2 = \hat{\ell}_1^2 + \hat{\ell}_2^2 + \hat{\ell}_3^2$  から、 $m^2 \leq \ell(\ell+1) < (\ell+1)^2$  から大体明らか。詳しい説明は角運動量の説明のところで。

$\ell \leq 2$  の具体例：

$$Y_{0,0} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$$

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

$$Y_{2,\pm 2} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2 \theta e^{\pm 2i\phi}, \quad Y_{2,\pm 1} = \mp \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin \theta \cos \theta e^{\pm i\phi}, \quad Y_{2,0} = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3 \cos^2 \theta - 1)$$

いくつか、知っておくべきこと：

- 球面調和関数は規格直行関数：

$$\int d\Omega Y_{\ell,m}^*(\theta, \phi) Y_{\ell',m'}(\theta, \phi) \equiv \int_{-1}^1 d\cos \theta \int_0^{2\pi} d\phi Y_{\ell,m}^*(\theta, \phi) Y_{\ell',m'}(\theta, \phi) = \delta_{\ell,\ell'} \delta_{m,m'}$$

- $Y_{\ell,m}$  は完全系をなす、従って球面上で定義された関数は  $Y_{\ell,m}$  を用いて展開できる。

$$f(\theta, \phi) = \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{\ell} a_{\ell,m} Y_{\ell,m}(\theta, \phi) \quad a_{\ell,m} = \int d\Omega Y_{\ell,m}^*(\theta, \phi) f(\theta, \phi)$$



## 1.4 動径方向波動関数

球対称なポテンシャルの場合、波動関数の角度依存部分は球面調和関数に取ることができる。

$$E\varphi(\vec{x}) = \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r - \frac{\hat{\ell}}{r^2} \right) + V(r) \right] \varphi(\vec{x})$$

上式に  $\varphi = R_\ell(r)Y_{\ell,m}(\theta, \phi)$  を代入して  $R_\ell$  の満たす方程式を書くと：

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} r - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right) + (V - E) \right] R_\ell = 0.$$

$R_\ell$ （およびそれに対応したエネルギー固有値）が求まれば、一般解も求まる：

$$\psi(t, \vec{x}) = \sum_n \sum_{\ell, m} e^{-iE_{n,\ell}t/\hbar} R_{n,\ell}(r) Y_{\ell,m}(\theta, \phi).$$

ここで、 $\psi_{n,\ell,m} \equiv e^{-iE_{n,\ell}t/\hbar} R_{n,\ell}(r) Y_{\ell,m}(\theta, \phi)$  は角運動量の固有状態を表す。

$$\begin{aligned} \hat{\vec{L}} &\equiv \hat{\vec{x}} \times \hat{\vec{p}} = \hbar \hat{\vec{\ell}} \\ \Rightarrow \hat{L}^2 \psi_{n,\ell,m} &= \ell(\ell+1) \hbar^2 \psi_{n,\ell,m} \\ \Rightarrow \hat{L}_z \psi_{n,\ell,m} &= m \hbar \psi_{n,\ell,m} \end{aligned}$$

状態を指定する3つの量子数：

- エネルギー： $E_{n,\ell}$
- 「角運動量の大きさ」： $\ell \hbar$
- 角運動量の z-成分： $m \hbar$

Notice:

エネルギー固有値と  $R_{n,\ell}$  とは、 $m$  ( $\hat{\ell}_z$  の固有値) に依らない。

## 1.5 3次元井戸型ポテンシャル

例として以下のポテンシャルを考える：

$$V = \begin{cases} 0 & : r < a \\ \infty & : r \geq a \end{cases}$$

エネルギーと角運動量の固有状態に対応した波動関数を求めてみる：

$$\psi(t, \vec{x}) \sim e^{-iE_{n,\ell}t/\hbar} R_{n,\ell}(r) Y_{\ell,m}(\theta, \phi).$$

以下、面倒なので添字 ( $n$  と  $\ell$ ) は書かない。

動径方向の波動関数の満たす方程式 (at  $r < a$ )：

$$\frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR}{dr} - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} R + \frac{2mE}{\hbar^2} R = 0. \quad (1.7)$$

満たすべき境界条件：

$$R(r = a) = 0. \quad (1.8)$$

以下の量を定義：

$$k \equiv \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \Rightarrow \rho = kr$$

すると Eq. (1.7) は以下ようになる：

$$R'' + \frac{2}{\rho} R' + \left[ 1 - \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2} \right] R = 0. \quad ' \equiv \partial_\rho$$

これは、球ベッセル関数の満たす微分方程式：

$\Rightarrow$  一般解は球ベッセル関数  $j_\ell$  と球ノイマン関数  $n_\ell$  の線形和

$\Rightarrow$  球ノイマン関数  $n_\ell$  は原点で発散する

$$j_\ell(\rho \rightarrow 0) \sim O(\rho^\ell), \quad n_\ell(\rho \rightarrow 0) \sim O(\rho^{-(\ell+1)})$$

$\Rightarrow R(r) = (\text{const.}) \times j_\ell(kr)$

球ベッセル関数  $j_\ell$  の  $n$  番目のゼロ点を  $\bar{\rho}_\ell^{(n)}$  とする。

$\Rightarrow$  境界条件 (1.8) から、エネルギーの量子化条件が得られる：

$$k_\ell^{(n)} a = \bar{\rho}_\ell^{(n)} \Rightarrow E_\ell^{(n)} = \frac{\hbar^2}{2ma^2} (\bar{\rho}_\ell^{(n)})^2$$

ベッセル関数のゼロ点の数値、Table 1 の通り：

	$n = 1$	$n = 2$	$n = 3$	$\dots$
$\ell = 0$	3.14	6.28	9.42	
$\ell = 1$	4.49	7.73		
$\ell = 2$	5.76	9.10		
$\ell = 3$	6.99			
$\ell = 4$	8.18			
$\ell = 5$	9.36			

Table 1: 10 以下の球ベッセル関数  $j_\ell$  の  $n$  番目のゼロ点。

## 1.6 2体問題

2体問題：ふたつの区別可能な粒子がある場合を考える

- 粒子1：質量  $m_1$ 、位置演算子  $\hat{x}_1 = (x_1, y_1, z_1)$ 、運動量演算子  $\hat{p}_1$
- 粒子2：質量  $m_2$ 、位置演算子  $\hat{x}_2 = (x_2, y_2, z_2)$ 、運動量演算子  $\hat{p}_2$

波動関数：

$$\psi(t, \vec{x}_1, \vec{x}_2) = \langle \vec{x}_1, \vec{x}_2 | \psi(t) \rangle$$

ハミルトニアン：

$$H = \frac{1}{2m_1} \hat{p}_1^2 + \frac{1}{2m_2} \hat{p}_2^2 + V(\hat{x}_1, \hat{x}_2) \rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m_1} \nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m_2} \nabla_2^2 + V(\vec{x}_1, \vec{x}_2)$$

$$\nabla_i^2 = \partial_{x_i}^2 + \partial_{y_i}^2 + \partial_{z_i}^2$$

ポテンシャルが粒子間の距離のみに依存する場合を考える。

$$V = V(|\vec{x}_1 - \vec{x}_2|)$$

エネルギー固有状態の波動関数に対する Schrödinger 方程式：

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m_1} \nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m_2} \nabla_2^2 + V(|\vec{x}_1 - \vec{x}_2|) \right] \varphi(\vec{x}_1, \vec{x}_2) = E \varphi(\vec{x}_1, \vec{x}_2)$$

重心座標と相対座標の導入：

- $\vec{R} \equiv \frac{m_1 \vec{x}_1 + m_2 \vec{x}_2}{m_1 + m_2} \equiv (\xi, \eta, \zeta)$

- $\vec{r} \equiv \vec{x}_1 - \vec{x}_2 \equiv (x, y, z)$

変数変換：

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial x_1} &= \frac{\partial \xi}{\partial x_1} \frac{\partial}{\partial \xi} + \frac{\partial x}{\partial x_1} \frac{\partial}{\partial x} = \frac{m_1}{m_1 + m_2} \frac{\partial}{\partial \xi} + \frac{\partial}{\partial x}, \\ \frac{\partial}{\partial x_2} &= \frac{\partial \xi}{\partial x_2} \frac{\partial}{\partial \xi} + \frac{\partial x}{\partial x_2} \frac{\partial}{\partial x} = \frac{m_2}{m_1 + m_2} \frac{\partial}{\partial \xi} - \frac{\partial}{\partial x}, \\ &\dots\end{aligned}$$

を用いて

$$\begin{aligned}& \frac{1}{2m_1} \nabla_1^2 + \frac{1}{2m_2} \nabla_2^2 \\ &= \frac{1}{2m_1} \left[ \frac{m_1^2}{(m_1 + m_2)^2} \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} + \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{2m_1}{m_1 + m_2} \frac{\partial}{\partial \xi} \frac{\partial}{\partial x} + \dots \right] \\ & \quad + \frac{1}{2m_2} \left[ \frac{m_2^2}{(m_1 + m_2)^2} \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} + \frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{2m_2}{m_1 + m_2} \frac{\partial}{\partial \xi} \frac{\partial}{\partial x} + \dots \right] + \dots \\ &= \frac{1}{2(m_1 + m_2)} \left( \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} + \frac{\partial^2}{\partial \eta^2} + \frac{\partial^2}{\partial \zeta^2} \right) + \frac{1}{2} \left( \frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} \right) \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right)\end{aligned}$$

系の全質量と、換算質量 (reduced mass) を定義：

- $M = m_1 + m_2$
- $\mu \equiv \left( \frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} \right)^{-1}$

Schödinger 方程式：

$$\begin{aligned}& \left[ -\frac{\hbar^2}{2M} \nabla_{\vec{R}}^2 - \frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_{\vec{r}}^2 + V(|\vec{r}|) \right] \varphi = E\varphi \\ & \nabla_{\vec{R}}^2 \equiv \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} + \frac{\partial^2}{\partial \eta^2} + \frac{\partial^2}{\partial \zeta^2} \\ & \nabla_{\vec{r}}^2 \equiv \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\end{aligned}$$

変数分離：

$$\varphi = \varphi_{\text{CM}}(\vec{R}) \varphi_{\text{rel}}(\vec{r})$$

すると

$$\frac{1}{\varphi_{\text{rel}}} \left[ -\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_{\vec{r}}^2 + V(|\vec{r}|) \right] \varphi_{\text{rel}} = -\frac{1}{\varphi_{\text{CM}}} \left[ -\frac{\hbar^2}{2M} \nabla_{\vec{R}}^2 - E \right] \varphi_{\text{CM}} \equiv E_{\text{rel}}$$

$V = V(\vec{x}_1 - \vec{x}_2)$  の時、波動関数は重心運動部分と相対運動部分に分離できる：

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2M} \nabla_{\vec{R}}^2 \varphi_{\text{CM}} &= (E - E_{\text{rel}}) \varphi_{\text{CM}} \equiv E_{\text{CM}} \varphi_{\text{CM}}, \\ \left[ -\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_{\vec{r}}^2 + V(|\vec{r}|) \right] \varphi_{\text{rel}} &= E_{\text{rel}} \varphi_{\text{rel}} \end{aligned}$$

- $\varphi_{\text{CM}}$ ：自由粒子（質量  $M$ ）の Schödinger 方程式に従う。
- $\varphi_{\text{rel}}$ ：中心力ポテンシャル中の粒子（質量  $\mu$ ）の Schödinger 方程式に従う。

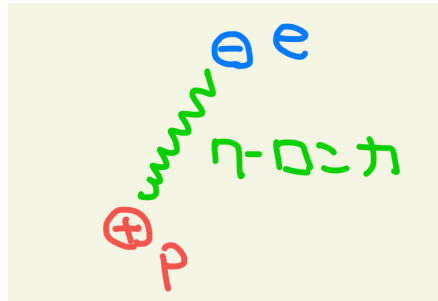
Reduced mass についてのコメント：

- $m_1 \ll m_2$  のとき  $\mu \equiv \left( \frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} \right)^{-1} \simeq m_1 - \frac{m_1^2}{m_2} + O(m_1^3/m_2^2)$

例えば水素原子（電子と陽子の結合状態）： $\frac{m_e}{m_p} \sim O(10^{-3})$

## 1.7 水素原子

3次元量子力学系の代表例：水素原子



以下、波動関数の相対運動部分のみに着目：

- $m \equiv \left( \frac{1}{m_e} + \frac{1}{m_p} \right)^{-1}$
- $E$ ：結合エネルギー（水素原子が静止している時のエネルギー）

$\Rightarrow$  束縛状態を考えるので  $E < 0$

Schroedinger 方程式：

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(t, \vec{x}) = \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \frac{e^2}{r} \right] \psi(t, \vec{x}).$$

波動関数（変数分離後）

$$\psi(t, \vec{x}) = e^{-iEt/\hbar} R_\ell(r) Y_{\ell,m}(\theta, \phi).$$

動径方向波動関数に対する方程式：

$$\frac{d^2 R_\ell}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR_\ell}{dr} + \left[ \frac{2m}{\hbar^2} \left( E + \frac{e^2}{r} \right) - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right] R_\ell = 0.$$

以下、上の方程式を満たす  $R_\ell$  を求める。上の式に  $-(\hbar^2/8mE)$  をかけて

$$-\frac{\hbar^2}{8mE} \left[ \frac{d^2 R_\ell}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR_\ell}{dr} \right] + \left[ -\frac{1}{4} + \left( -\frac{1}{4E} \right) \frac{e^2}{r} + \left( -\frac{\hbar^2}{8mE} \right) \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right] R_\ell = 0.$$

新しい変数を定義：

$$\rho \equiv \sqrt{\frac{8m|E|}{\hbar^2}} r, \\ \lambda \equiv \frac{e^2}{\hbar} \sqrt{\frac{m}{2|E|}} = \alpha \sqrt{\frac{mc^2}{2|E|}}. \quad \alpha \equiv \frac{e^2}{\hbar c} \simeq \frac{1}{137}$$

$r$  微分を  $\rho$  微分で書き直すなどすると

$$\frac{d^2 R_\ell}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{dR_\ell}{d\rho} - \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2} R_\ell + \left( \frac{\lambda}{\rho} - \frac{1}{4} \right) R_\ell = 0.$$

エネルギー固有値は  $\lambda$  が求まれば決まる。

以下、物理的状況を記述する  $R_\ell$  を求める。

- 波動関数は規格化可能。
- $R'_\ell(r \rightarrow 0) = 0$ 、 $R_\ell(r \rightarrow \infty) = 0$

$R_\ell$  を以下のようにおく：

$$R_\ell = e^{-\rho/2} F_\ell(\rho).$$

すると  $F_\ell$  の従う方程式は ( $' \equiv \partial_\rho$  として) :

$$F_\ell'' - \left(1 - \frac{2}{\rho}\right) F_\ell' + \left[\frac{\lambda - 1}{\rho} - \frac{\ell(\ell + 1)}{\rho^2}\right] F_\ell = 0.$$

$F_\ell$  を級数展開して求める :

$$F_\ell(\rho) = \rho^s \sum_{\nu=0}^{\infty} a_\nu \rho^\nu \equiv \rho^s L(\rho).$$

ただし :

- $a_0 \neq 0 \Rightarrow L(\rho \rightarrow 0) \neq 0$
- $s \geq 0$  (原点で波動関数は有界)

有用な式 :

$$\begin{aligned} F_\ell' &= s\rho^{s-1}L + \rho^s L', \\ F_\ell'' &= s(s-1)\rho^{s-2}L + 2s\rho^{s-1}L' + \rho^s L''. \end{aligned}$$

これらを使うと :

$$\rho^2 L'' + \rho[2(s+1) - \rho] L' + [\rho(\lambda - s - 1) + s(s+1) - \ell(\ell+1)] L = 0.$$

まず、原点近傍 ( $\rho \rightarrow 0$ ) での振る舞い : 最後の 2 項 (赤字) が重要。

$$\Rightarrow L(0) \neq 0 \text{ より、} s(s+1) = \ell(\ell+1)。$$

$$\Rightarrow s \geq 0 \text{ より } s = \ell。$$

$\ell = 0$  のとき、 $s = -1$  でも波動関数の規格化は一見可能 (原点近傍で  $\psi \sim r^{-1}$ )。ただしこのとき、原点近傍で  $\nabla^2 \psi \sim \delta(r)$  となるため、Schroedinger 方程式を満たさない。

$s = \ell$  を考慮して :

$$L'' + \left[\frac{2(s+1)}{\rho} - 1\right] L' + \frac{(\lambda - \ell - 1)}{\rho} L = 0. \quad (1.9)$$

ただし

$$\begin{aligned} F_\ell &= \rho^\ell L(\rho) \\ L(0) &\neq 0. \end{aligned}$$

Eq. (1.9) に  $L(\rho) = \sum_{\nu} a_{\nu} \rho^{\nu}$  を代入：

$$\sum_{\nu=0}^{\infty} \left[ \nu(\nu-1)a_{\nu}\rho^{\nu-2} + \left( \frac{2\ell(\ell+1)}{\rho} - 1 \right) \nu a_{\nu}\rho^{\nu-1} + (\lambda - \ell - 1)a_{\nu}\rho^{\nu-1} \right] = 0.$$

これを整理して

$$\sum_{\nu=0}^{\infty} [(\nu+1)(\nu+2\ell+2)a_{\nu+1} + (\lambda - \ell - 1 - \nu)a_{\nu}] \rho^{\nu-1} = 0.$$

$\rho$  の各次数で係数がゼロでないといけないので

$$a_{\nu+1} = \frac{\nu + \ell + 1 - \lambda}{(\nu+1)(\nu+2\ell+2)} a_{\nu}. \quad (1.10)$$

続いて、無限遠点でのふるまい： $\nu \rightarrow \infty$  の項が重要。

$$\frac{a_{\nu+1}}{a_{\nu}} \xrightarrow{\nu \rightarrow \infty} \frac{1}{\nu}.$$

したがって ( $a_{\nu}$  がどこまでいってもゼロにならないとすると)：

$$\begin{aligned} L(\rho \rightarrow \infty) &\sim \sum_{\nu} \frac{1}{\nu!} \rho^{\nu} \sim e^{\rho}. \\ \Rightarrow R_{\ell}(\rho \rightarrow \infty) &\sim e^{-\rho/2} \rho^{\ell} e^{\rho} \sim \rho^{\ell} e^{\rho/2} \xrightarrow{\nu \rightarrow \infty} \infty. \end{aligned}$$

この場合規格化可能な波動関数が得られない。

$r \rightarrow \infty$  で  $R_{\ell} \rightarrow 0$  となる条件：

ある  $\nu$  (それを  $\tilde{\nu}$  とする) で  $a_{\tilde{\nu}} = 0$ 。この条件が、可能なエネルギー固有値を与える。

$\lambda = n$  ( $n$  は  $\ell + 1$  以上の整数) のとき、必ずそういった  $\tilde{\nu}$  が存在。

$$\Rightarrow \tilde{\nu} = n - \ell \quad (\text{See Eq. (1.10)})$$

軌道角運動量の大きさが  $\ell\hbar$  のとき、可能なエネルギー固有値：

$$\begin{aligned} \lambda &\equiv \frac{e^2}{\hbar} \sqrt{\frac{m}{2|E|}} \quad (\text{かつ } E < 0) \\ \Rightarrow E_n &= -\frac{e^4 m}{2\hbar^2} \times \frac{1}{n^2} = -\frac{1}{2} \alpha^2 m c^2 \times \frac{1}{n^2} \\ n &= \ell + 1, \ell + 2, \dots \end{aligned}$$



$n$  は「主量子数」と呼ばれる。

ときどき使われる記法：

$$\frac{1}{2}\alpha^2 mc^2 \equiv \text{Ry} \simeq 13.6 \text{ eV} \quad \Rightarrow \quad E_n = -\text{Ry} \times \frac{1}{n^2}$$

$\lambda = n$  のときの関数  $L$  は Laguerre の陪多項式と呼ばれる。

$$\rho \partial_\rho^2 L_q^p + (p+1-\rho) \partial_\rho L_q^p + (q-p) L_q^p = 0$$

$$p+1 \leftrightarrow 2(\ell+1) \quad \& \quad q-p \leftrightarrow n-\ell-1$$

$$L_q^p(\rho) = \sum_{k=0}^{q-p} (-1)^k \frac{(q!)^2}{(q-p-k)!(p+k)!k!} \rho^k.$$

動径方向波動関数： $R_\ell = (\text{定数}) \times e^{-\rho/2} \rho^\ell L_{n+\ell}^{2\ell+1}(\rho)$

$$\begin{aligned} \rho &= \sqrt{\frac{8m|E|}{\hbar^2}} r \\ &\Downarrow \quad E = -\frac{\alpha^2 (mc^2)}{2n^2} \\ &= 2 \frac{\alpha mc}{n\hbar} r \\ &= \frac{2}{n} \frac{r}{a_B} \end{aligned}$$

ただし：

$$a_B \equiv \frac{\hbar}{\alpha mc} : \text{ボーア半径}$$

エネルギー、角運動量同時固有状態を表す波動関数：

$$\psi_{n,\ell,m} = e^{-iE_n t/\hbar} \sqrt{\left(\frac{2}{na_B}\right)^3 \frac{(n-\ell-1)!}{2n\{(n+\ell)!\}^3}} e^{-r/na_B} \left(\frac{2}{na_B} r\right)^\ell L_{n+\ell}^{2\ell+1}(2r/na_B) Y_{\ell,m}(\theta, \phi).$$

上の波動関数が規格化条件を満たすことは各自チェック：

$$\int d^3x \psi_{n,\ell,m}^*(\vec{x}) \psi_{n',\ell',m'}(\vec{x}) = \delta_{n,n'} \delta_{\ell,\ell'} \delta_{m,m'}.$$

まとめ：水素原子のエネルギー準位

注：球対称なポテンシャルを考えたとき、エネルギーが縮退した状態は最低  $2\ell+1$  個ある（角運動量の大きさが等しい状態の数）。

		$n = 1$	$n = 2$	$n = 3$	$n = 4$	$\dots$
s	$\ell = 0$	1	1/4	1/9	1/16	$\dots$
p	$\ell = 0$	x	1/4	1/9	1/16	$\dots$
d	$\ell = 0$	x	x	1/9	1/16	$\dots$
f	$\ell = 0$	x	x	x	1/16	$\dots$

Table 2:  $E_n/E_1$  の値。x のところはそのような状態はない。

水素原子では ( $1/r$  ポテンシャルの効果のみを考えた最低次の計算では) 縮退度はさらに高い:

$$N_n = \sum_{\ell=0}^{n-1} (2\ell + 1) = n^2.$$

## 1.8 Rydberg 原子

以下、水素原子の場合の知識を元に、Rydberg 原子のエネルギー準位について考察:

- 最外核電子のみが大きく励起された状態: Rydberg 原子
- Alkali 金属 (最外核に電子 1 個): Li, Na, K, Rb,  $\dots$
- 内核の電子はそのままの状態に止まると近似。

最外核電子の感じるポテンシャル

原子核の作るポテンシャルと内核電子の作るポテンシャルの和

$$V = V_{\text{nuc}} + V_{\text{elec}}$$

原子核の作るポテンシャル:

$$V_{\text{nuc}} = -\frac{Ze^2}{r}$$

内核電子の作るポテンシャル:

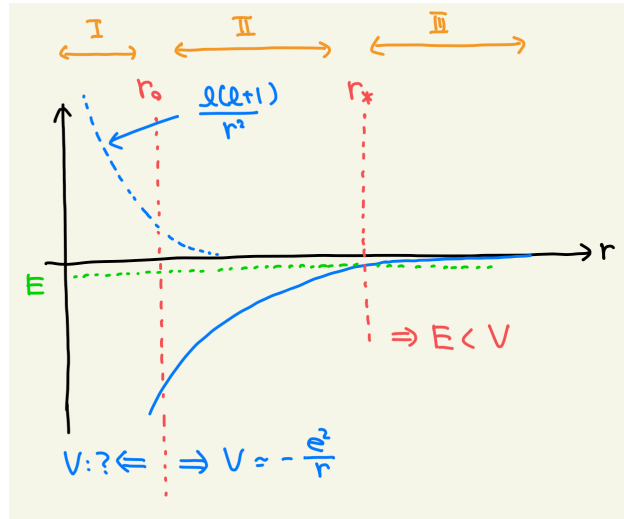
- 球対称ポテンシャルで近似 (最外核電子の効果を検討しなければ、球対称)
- 内殻電子の軌道半径 ( $r_0$ ) より内側では複雑な振る舞い。
- 内殻電子の軌道半径 ( $r_0$ ) より外側では、 $r^{-1}$  に比例:

$$V_{\text{elec}}(r \gg r_0) \simeq \frac{(Z-1)e^2}{r}$$

ポテンシャルが球対称なので、波動関数を動径方向部分と角度部分に分離できる：

$$\psi(t, \vec{x}) = e^{-iEt/\hbar} R_\ell(r) Y_{\ell,m}(\theta, \phi).$$

束縛状態を考えるので、 $E < 0$ 。



解くべき（動径方向）Schrodinger 方程式：

$$\frac{d^2 R_\ell}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR_\ell}{dr} + \left[ \frac{2m}{\hbar^2} (E - V(r)) - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right] R_\ell = 0. \quad (1.11)$$

あるいは  $R_\ell(r) = \chi_\ell/r$  とすると

$$\frac{d^2 \chi_\ell}{dr^2} + \left[ \frac{2m}{\hbar^2} (E - V(r)) - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right] \chi_\ell = 0. \quad (1.12)$$

ただしポテンシャルは、以下の性質を満たす：

$$V(r \gg r_0) \simeq -\frac{e^2}{r}$$

以下、 $|E| \ll \frac{e^2}{a_B}$  に存在する（であろう）束縛状態を考える。

⇒ 以下の議論のため、エネルギーを以下のように表す：

$$E = -\frac{1}{2} \alpha^2 m c^2 \frac{1}{\lambda^2} \Leftrightarrow \lambda \equiv \frac{e^2}{\hbar} \sqrt{\frac{m}{2|E|}} = \alpha \sqrt{\frac{m c^2}{2|E|}} : \lambda \text{ を決めればエネルギーが決まる}$$

方程式 (1.11) は、2 階の線形微分方程式：

$\Rightarrow$  2 つの独立な解が存在

$r \rightarrow 0$  での振る舞いで分類：

- $f_\ell(r; \lambda)$ :  $r \rightarrow 0$  で有限 ( $f_\ell(r \rightarrow 0) \propto r^\ell$ )
- $g_\ell(r; \lambda)$ :  $r \rightarrow 0$  で発散 ( $g_\ell(r \rightarrow 0) \propto r^{-\ell-1}$ )

$r \rightarrow \infty$  での振る舞いで分類： $\partial_r^2 \chi_\ell \simeq \frac{2m|E|}{\hbar^2} \chi_\ell$

- $u_\ell(r; \lambda)$ :  $r \rightarrow \infty$  で指数関数的に減少
- $v_\ell(r; \lambda)$ :  $r \rightarrow \infty$  で指数関数的に発散

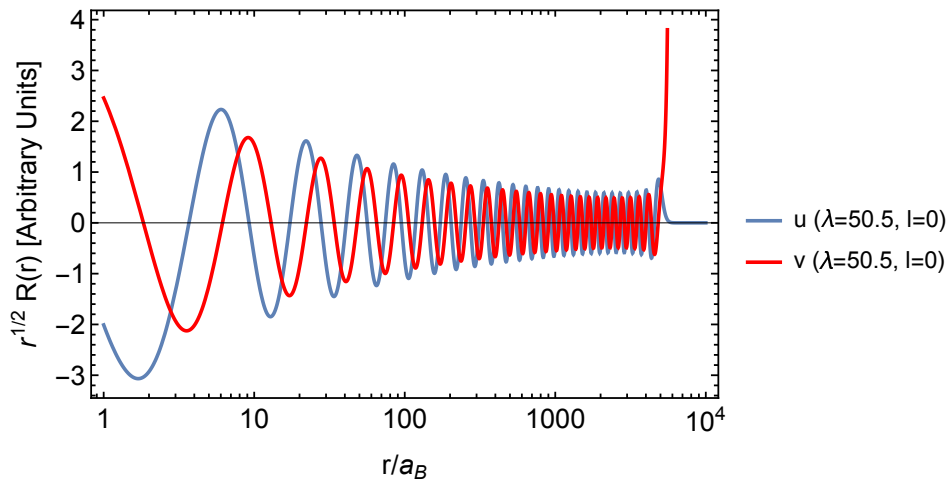


Figure 1: 関数  $u$  と  $v$  の例 ( $\lambda = 50.5$ ,  $\ell = 0$ )。

独立な関数が 2 個しかないことから： $f_\ell(r) = a_\ell(\lambda)u_\ell(r) + b_\ell(\lambda)v_\ell(r)$

$\Rightarrow$  エネルギーの量子化条件： $b_\ell(\lambda) = 0$

Rydberg 原子について：

- $r \ll r_*$  では、 $|E| \ll |V|$   
 $\Rightarrow r \ll r_*$  では、波動関数の形は  $E$  に（ほとんど）依存しない。

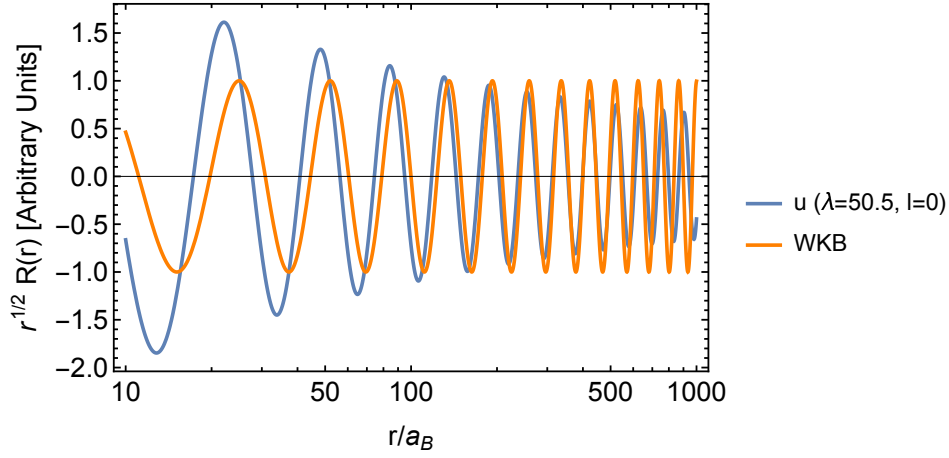


Figure 2: 関数  $u$  と WKB 近似の結果の比較。

$r_0 \ll r \ll r_*$  で、かつ  $r^2$  項が効かないくらい大きな  $r$  を考えると Eq. (1.12) から：

$$\frac{d^2 \chi_\ell}{dr^2} \simeq -\frac{2m e^2}{\hbar^2} \frac{1}{r} \chi_\ell \equiv -\frac{p^2(r)}{\hbar^2} \chi_\ell \quad \Leftrightarrow \quad p = \sqrt{2m(E - V)} \quad (1.13)$$

近似解 (WKB 近似)：

$$\chi_\ell(r) \sim \sin[\Theta(r) - \varphi_\ell]$$

$$\Theta(r) = \frac{1}{\hbar} \int^r dr' p(r') \simeq \frac{1}{\hbar} \int^r dr' \sqrt{-2mV(r')} \simeq \frac{1}{\hbar} \int^r dr' \sqrt{\frac{2me^2}{r'}} = 2\sqrt{2}(r/a_B)^{1/2}$$

$r_0 \ll r \ll r_*$  で、波動関数は振動

- 位相  $\varphi_\ell$  は、 $r \lesssim r_0$  のポテンシャルの詳細によって決まる。
- 位相  $\varphi_\ell$  は角運動量の大きさに依存。

関数  $u(r; \lambda)$  の  $r_0 \ll r \ll r_*$  での振る舞い：

- 関数  $u(r; \lambda)$  も WKB 近似から示唆される性質を示す。
- 位相パラメータはエネルギーに依存。

$$u_\ell(r; \lambda) \sim \sin[\Theta(r) - \tilde{\varphi}_\ell(\lambda)]$$

$\tilde{\varphi}_\ell(\lambda) \simeq \varphi_\ell \pmod{\pi}$  なる  $\lambda$  のみが許される：

$\Rightarrow$  エネルギーの量子化条件

重要な性質： $\tilde{\varphi}_\ell(\lambda + 1) \simeq \tilde{\varphi}_\ell(\lambda) + \pi$

⇒ 水素原子の場合：許されるのは  $\lambda = 1, 2, 3, \dots$

⇒ Rydberg 原子の場合：許されるのは  $\lambda = n - \delta_\ell$  ( $n$  は自然数)

$\delta_\ell$  は角運動量の大きさに依存する定数: “Quantum defect”

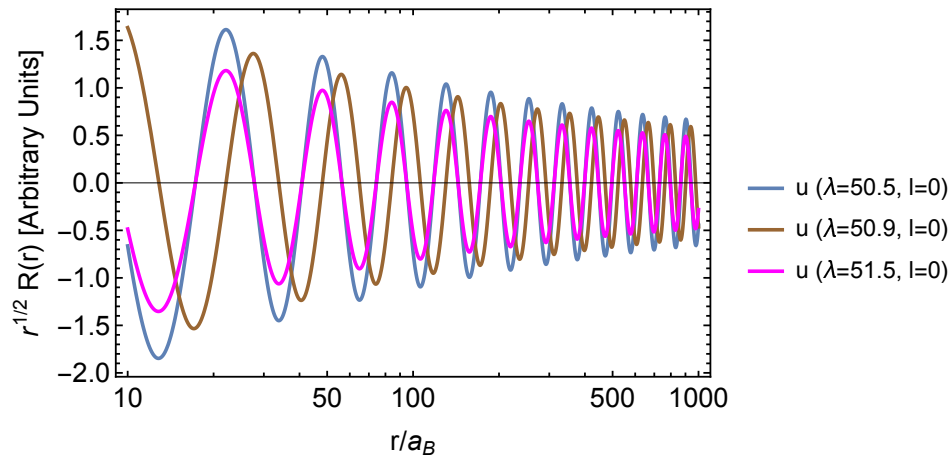


Figure 3: いくつかの  $\lambda$  に対する関数  $u$  のふるまい。

Rydberg 原子の最外核電子のエネルギー準位： $E_{n,\ell} = -\frac{1}{2}\alpha^2 mc^2 \frac{1}{(n - \delta_\ell)^2}$

- 同じ  $n$  でも異なる  $\ell$  に対するエネルギーは（一般には）異なる
- $\delta_\ell < 0$ ：それぞれの原子に特有の値（例えば実験値を元に決められる）

$\ell$	$\delta_\ell$
0	3.13
1	2.64
2	1.35
3	0.016
$\geq 4$	$\sim 0$

Table 3: Rb の quantum defect [Löw et al, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 45 (2012) 113001]

## 2 角運動量

### 2.1 古典論からの類推

古典論における角運動量：

- $\vec{L} = \vec{x} \times \vec{p}$  あるいは  $L_a = \epsilon_{abc} x_b p_c$

2つ重複している添字については、1-3で和をとる。

- ポテンシャルが回転対称性を持つ時、 $\vec{L}$  は保存量

$$\dot{\vec{L}} = \{\vec{L}, H\}_{\text{P}} = 0 \text{ for } V = V(|\vec{x}|)$$

量子論における（1粒子の軌道）角運動量演算子を以下のように定義：

$$\hat{\vec{L}} = \hat{\vec{x}} \times \hat{\vec{p}} \text{ あるいは } \hat{L}_a = \epsilon_{abc} \hat{x}_b \hat{p}_c$$

成分で書くと：

$$\hat{L}_x = \hat{y} \hat{p}_z - \hat{z} \hat{p}_y$$

$$\hat{L}_y = \hat{z} \hat{p}_x - \hat{x} \hat{p}_z$$

$$\hat{L}_z = \hat{x} \hat{p}_y - \hat{y} \hat{p}_x$$

注：角運動量演算子はエルミートな演算子

$$\hat{L}_a^\dagger = \hat{L}_a$$

### 2.2 角運動量の満たす交換関係

出発点：

- $\hat{L}_a = \epsilon_{abc} \hat{x}_b \hat{p}_c$
- $[\hat{x}_a, \hat{p}_b] = i\hbar \delta_{ab}$

まず、位置演算子について（以下、面倒なので演算子の $\hat{\phantom{x}}$ を省略）：

$$\begin{aligned}
 [x_a, L_b] &= [x_a, \epsilon_{bcd}x_cp_d] \\
 &= [x_a, \epsilon_{bcd}x_cp_d] \\
 &= \epsilon_{bcd}(x_ax_cp_d - x_cp_dx_a) \\
 &= \epsilon_{bcd}x_c[x_ap_d - p_dx_a] \\
 &= \epsilon_{bcd}x_c \times i\hbar\delta_{ad} \\
 &= i\hbar\epsilon_{abc}x_c
 \end{aligned}$$

運動量演算子についても同様にして：

$$[p_a, L_b] = i\hbar\epsilon_{abc}p_c$$

続いて、角運動量演算子どうしの交換関係：

$$\begin{aligned}
 [L_a, L_b] &= [\epsilon_{acd}x_cp_d, \epsilon_{bef}x_ep_f] \\
 &= \epsilon_{acd}\epsilon_{bef}(x_cp_dx_ep_f - x_ep_fx_cp_d) \\
 &= \epsilon_{acd}\epsilon_{bef}[(x_cp_dx_ep_f - x_cx_ep_dp_f + x_cx_ep_dp_f) - (x_ep_fx_cp_d - x_ex_cp_fp_d + x_ex_cp_fp_d)] \\
 &= \epsilon_{acd}\epsilon_{bef}[-i\hbar\delta_{de}x_cp_f + i\hbar\delta_{cf}x_ep_d] \\
 &\quad \Downarrow \quad \epsilon_{acd}\epsilon_{bdf} = \delta_{af}\delta_{bc} - \delta_{ab}\delta_{cf} \\
 &= -i\hbar[(x_bp_a - \delta_{ab}x_cp_c) - (x_ap_b - \delta_{ab}x_cp_c)] \\
 &= i\hbar(x_ap_b - x_bp_a) \\
 &\quad \Downarrow \quad L_c = \epsilon_{cde}x_dp_e \Rightarrow \epsilon_{abc}L_c = x_ap_b - x_bp_a \\
 &= i\hbar\epsilon_{abc}L_c
 \end{aligned}$$

上の計算はちよつとごちゃごちゃしているので具体的に：

$$\begin{aligned}
 [L_x, L_y] &= [yp_z - zp_y, zp_x - xp_z] \\
 &= [yp_z, zp_x] + [-zp_y, -xp_z] \\
 &= yp_x[p_z, z] + xp_y[z, p_z] \\
 &= i\hbar(xp_y - yp_x) \\
 &= i\hbar L_z
 \end{aligned}$$

同様の計算を繰り返すと：

$$[L_x, L_y] = i\hbar L_z$$

$$[L_y, L_z] = i\hbar L_x$$



$$[L_z, L_x] = i\hbar L_y$$

まとめ：

$$[x_a, L_b] = i\hbar \epsilon_{abc} x_c$$

$$[p_a, L_b] = i\hbar \epsilon_{abc} p_c$$

$$[L_a, L_b] = i\hbar \epsilon_{abc} L_c$$

## 2.3 角運動量と空間回転

位置演算子の固有状態（固有値  $\vec{a}$ ）を考える：

$$\hat{\vec{x}} |\vec{a}\rangle = \vec{a} |\vec{a}\rangle$$

この状態から、新しい状態  $|\vec{a}'\rangle$  を定義：

$$|\vec{a}'\rangle \equiv \left[ 1 - \frac{i}{\hbar} (\delta\phi_a) \hat{L}_a \right] |\vec{a}\rangle$$

ただし  $(\delta\phi_a)$  は微少量

$\Rightarrow (\delta\phi_i)$  の 2 次以上はとりあえず無視。

以下、 $|\vec{a}'\rangle$  もやはり位置演算子の固有状態であることを見る：

$$\begin{aligned} \hat{x}_a |\vec{a}'\rangle &= \hat{x}_a \left[ 1 - \frac{i}{\hbar} (\delta\phi_b) \hat{L}_b \right] |\vec{a}\rangle \\ &= \left[ \hat{x}_a - \frac{i}{\hbar} (\delta\phi_b) (\hat{x}_a \hat{L}_b - \hat{L}_b \hat{x}_a) - \frac{i}{\hbar} (\delta\phi_b) \hat{L}_b \hat{x}_a \right] |\vec{a}\rangle \\ &\quad \Downarrow \quad [x_a, L_b] = i\hbar \epsilon_{abc} x_c \quad \& \quad \hat{\vec{x}} |\vec{a}\rangle = \vec{a} |\vec{a}\rangle \\ &= \left[ a_a - \frac{i}{\hbar} (\delta\phi_b) (i\hbar \epsilon_{abc} x_c) - \frac{i}{\hbar} (\delta\phi_b) \hat{L}_b a_a \right] |\vec{a}\rangle \\ &= a_a \left[ 1 - \frac{i}{\hbar} (\delta\phi_b) \hat{L}_b \right] |\vec{a}\rangle + \epsilon_{abc} (\delta\phi_b) a_c |\vec{a}\rangle \\ &= [a_a + \epsilon_{abc} (\delta\phi_b) a_c] \left[ 1 - \frac{i}{\hbar} (\delta\phi_b) \hat{L}_b \right] |\vec{a}\rangle + O(\delta\phi^2) \\ &= [a_a + \epsilon_{abc} (\delta\phi_b) a_c] |\vec{a}'\rangle + O(\delta\phi^2) \end{aligned}$$

従って  $|\vec{a}'\rangle$  も位置演算子の固有状態：

$$\Rightarrow \text{固有値: } a'_a = a_a + \epsilon_{abc}(\delta\phi_b)a_c \Rightarrow \vec{a}' = \vec{a} + \vec{\delta\phi} \times \vec{a}$$

注:  $\vec{a}$  と  $\vec{a}'$  は同じ長さのベクトル

$$\vec{a}'\vec{a}' = \vec{a}\vec{a} + O(\delta\phi^2)$$

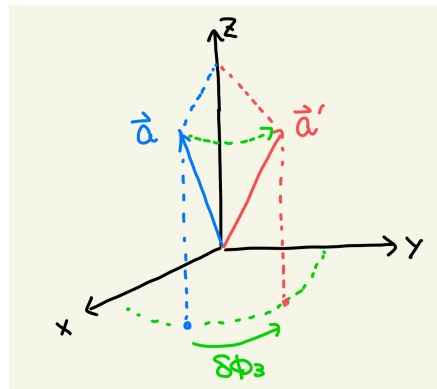
$\Rightarrow |\vec{a}\rangle$  にある回転操作を施すと  $|\vec{a}'\rangle$  となる。

- 回転軸:  $\vec{\delta\phi}$  の方向
- 回転角:  $\delta\phi$  の大きさ

$\Rightarrow$  角運動量演算子 = 回転の生成子

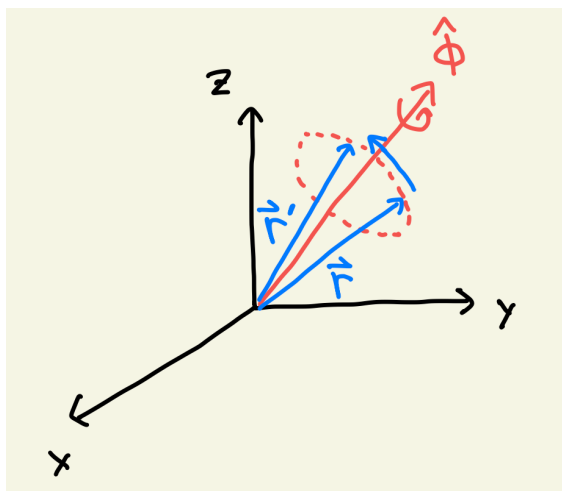
例:  $\vec{\delta\phi} = (0, 0, \delta\phi_3)$

$\Rightarrow \vec{a}' = (a_1 - a_2\delta\phi_3, a_2 + a_1\delta\phi_3, a_3)$ :  $z$  軸まわりの回転角  $\delta\phi_3$  の回転



有限の回転角の場合

- 回転を特徴づけるベクトル:  $\vec{\phi}$ 
  - 回転軸:  $\vec{\phi}$  の方向
  - 回転角:  $\vec{\phi}$  の大きさ



回転操作によって得られる状態：

$$\begin{aligned}
 |\vec{a}\rangle' &= \lim_{n \rightarrow \infty} \left[ 1 - \frac{i}{\hbar} \frac{\vec{\phi}}{n} \hat{L} \right]^n |\vec{a}\rangle \quad \Leftarrow \delta\vec{\phi} \simeq \frac{\vec{\phi}}{n} \\
 &\Downarrow \quad \lim_{n \rightarrow \infty} \left( 1 + \frac{x}{n} \right)^n = e^x \\
 &= \exp \left[ -\frac{i}{\hbar} \vec{\phi} \hat{L} \right] |\vec{a}\rangle \equiv \hat{U}(\vec{\phi}) |\vec{a}\rangle
 \end{aligned}$$

注： $\hat{U}(\vec{\phi})$  はユニタリな演算子

$$\hat{U}^\dagger = \hat{U}^{-1} \quad \Leftrightarrow \quad \hat{L}_a \text{ はエルミート演算子}$$

$\vec{\phi}$  で特徴付けられる回転でベクトル  $\vec{a}$  が以下のように変換するとする：

$$\vec{a}' = R(\vec{\phi}) \vec{a}$$

$R(\vec{\phi})$  は  $3 \times 3$  の正規直行行列 ( $R^T R = 1$ 、 $\det R = 1$ )

すると

$$\hat{U}(\vec{\phi}) \equiv \exp \left[ -\frac{i}{\hbar} \vec{\phi} \hat{L} \right]$$

に対して

$$\hat{U} \hat{x} \hat{U}^\dagger = R(\vec{\phi})^{-1} \hat{x}, \quad \hat{U} \hat{p} \hat{U}^\dagger = R(\vec{\phi})^{-1} \hat{p}.$$

$\hat{\mathcal{U}}\hat{x}\hat{\mathcal{U}}^\dagger = R'\hat{x}$  としてみる。 $\hat{\mathcal{U}}|\vec{a}\rangle = |R\vec{a}\rangle$  を使って：

$$\begin{aligned}\hat{\mathcal{U}}\hat{x}|\vec{a}\rangle &= \hat{\mathcal{U}}\hat{\mathcal{U}}^\dagger\hat{\mathcal{U}}\hat{x}|\vec{a}\rangle = \hat{\mathcal{U}}\hat{x}|\vec{a}\rangle = \vec{a}|R\vec{a}\rangle \\ &= \hat{\mathcal{U}}\hat{x}\hat{\mathcal{U}}^\dagger\hat{\mathcal{U}}|\vec{a}\rangle = (R'\hat{x})|Ra\rangle = (R'R\vec{a})|Ra\rangle\end{aligned}$$

従って  $R' = R^{-1}$ 。

ハミルトニアンの中に入っている  $\hat{x}$  と  $\hat{p}$  について、全てベクトル添字が縮約を取られていたら ( $\hat{x}_a\hat{x}_a$ ,  $\hat{p}_a\hat{p}_a$ ,  $\hat{x}_a\hat{p}_a$ , など)

- Hamiltonian は空間回転に対して不変
- $[L_a, H] = 0$

$\hat{\alpha}$  を位置演算子か運動量演算子として

$$\begin{aligned}[L_x, (\hat{\alpha}_1\hat{\alpha}_2)(\hat{\alpha}_3\hat{\alpha}_4)\cdots] &= i\hbar \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\vec{\phi}\hat{L}\right) \left[(\hat{\alpha}_1\hat{\alpha}_2)(\hat{\alpha}_3\hat{\alpha}_4)\cdots\right] \exp\left(\frac{i}{\hbar}\vec{\phi}\hat{L}\right) \Big|_{O(\phi_x)} \\ &= i\hbar \hat{\mathcal{U}} \left[(\hat{\alpha}_1\hat{\mathcal{U}}^\dagger\hat{\mathcal{U}}\hat{\alpha}_2)\hat{\mathcal{U}}^\dagger\hat{\mathcal{U}}(\hat{\alpha}_3\hat{\mathcal{U}}^\dagger\hat{\mathcal{U}}\hat{\alpha}_4)\hat{\mathcal{U}}^\dagger\hat{\mathcal{U}}\cdots\right] \hat{\mathcal{U}}^\dagger \Big|_{O(\phi_x)} \\ &= i\hbar \left[(\hat{\alpha}_1R'^T R'\hat{\alpha}_2)(\hat{\alpha}_3R'^T R'\hat{\alpha}_4)\cdots\right] \Big|_{O(\phi_x)} \\ &= i\hbar \left[(\hat{\alpha}_1\hat{\alpha}_2)(\hat{\alpha}_3\hat{\alpha}_4)\cdots\right] \Big|_{O(\phi_x)} = 0\end{aligned}$$

## 2.4 角運動量の固有値と固有状態

### 回転群

回転に対して、状態（あるいは演算子）はどのように変換するべきか？

$$|\vec{a}\rangle' = \hat{\mathcal{U}}(\vec{\phi})|\vec{a}\rangle \quad \text{with} \quad \hat{\mathcal{U}}(\vec{\phi}) = \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\vec{\phi}\hat{L}\right] \simeq 1 - \frac{i}{\hbar}\vec{\phi}\hat{L} \quad \text{for } |\vec{\phi}| \ll 1$$

ある状態のセットが、回転に対して  $|\vec{a}\rangle$  と「同様の」変換則を満たすとする：

1. 状態  $|\alpha\rangle$  が、ベクトル  $\vec{\phi}$  で特徴付けられる回転に対して以下のように変換するとする：

$$|\alpha'\rangle = \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\vec{\phi}\hat{J}\right]|\alpha\rangle$$

$\hat{J} = (\hat{J}_x, \hat{J}_y, \hat{J}_z)$  は  $|\alpha\rangle$  の回転を規定する演算子

2. もしも

$$\exp \left[ -\frac{i}{\hbar} \vec{\phi}_1 \hat{\vec{L}} \right] \exp \left[ -\frac{i}{\hbar} \vec{\phi}_2 \hat{\vec{L}} \right] \cdots \exp \left[ -\frac{i}{\hbar} \vec{\phi}_n \hat{\vec{L}} \right] = \exp \left[ -\frac{i}{\hbar} \vec{\phi} \hat{\vec{L}} \right]$$

なら

$$\exp \left[ -\frac{i}{\hbar} \vec{\phi}_1 \hat{\vec{J}} \right] \exp \left[ -\frac{i}{\hbar} \vec{\phi}_2 \hat{\vec{J}} \right] \cdots \exp \left[ -\frac{i}{\hbar} \vec{\phi}_n \hat{\vec{J}} \right] = \exp \left[ -\frac{i}{\hbar} \vec{\phi} \hat{\vec{J}} \right]$$

であって欲しい。

3. 微小回転について考えると、 $\hat{J}$  の満たすべき交換関係が得られる。

$$\begin{aligned} \exp \left[ -\frac{i}{\hbar} \vec{\phi}_1 \hat{\vec{L}} \right] &\simeq 1 - \frac{i}{\hbar} \vec{\phi}_1 \hat{\vec{L}} + \cdots \\ \exp \left[ -\frac{i}{\hbar} \vec{\phi}_1 \hat{\vec{J}} \right] &\simeq 1 - \frac{i}{\hbar} \vec{\phi}_1 \hat{\vec{J}} + \cdots \end{aligned}$$

回転に対して  $|\vec{a}\rangle$  と「同様の」変換則を満たす条件

- 例えば  $x$ -軸と  $y$ -軸周りの微小回転を考えると

$$\begin{aligned} &\exp \left[ 1 - \frac{i}{\hbar} \phi_x \hat{L}_x \right] \exp \left[ 1 - \frac{i}{\hbar} \phi_y \hat{L}_y \right] \exp \left[ 1 + \frac{i}{\hbar} \phi_x \hat{L}_x \right] \exp \left[ 1 + \frac{i}{\hbar} \phi_y \hat{L}_y \right] \\ &\simeq 1 - \frac{1}{\hbar^2} \phi_x \phi_y (\hat{L}_x \hat{L}_y - \hat{L}_y \hat{L}_x) + \cdots \\ &= 1 - \frac{i}{\hbar} \phi_x \phi_y \hat{L}_z + \cdots \end{aligned}$$

- 一方  $\hat{\vec{J}}$  について：

$$\begin{aligned} &\exp \left[ 1 - \frac{i}{\hbar} \phi_x \hat{J}_x \right] \exp \left[ 1 - \frac{i}{\hbar} \phi_y \hat{J}_y \right] \exp \left[ 1 + \frac{i}{\hbar} \phi_x \hat{J}_x \right] \exp \left[ 1 + \frac{i}{\hbar} \phi_y \hat{J}_y \right] \\ &\simeq 1 - \frac{1}{\hbar^2} \phi_x \phi_y (\hat{J}_x \hat{J}_y - \hat{J}_y \hat{J}_x) + \cdots \end{aligned}$$

$\hat{\vec{L}}$  の場合との対比から、これが  $1 - \frac{i}{\hbar} \phi_x \phi_y \hat{J}_z + \cdots$  でなくてははいけない。

- 他の軸の周りの回転についても、同様の議論ができる。

- $\hat{\vec{J}}$  の満たすべき交換関係： $[J_a, J_b] = i\hbar \epsilon_{abc} J_c$

ちなみに、回転操作は群をなす：

- 任意の  $\vec{\phi}_1$  と  $\vec{\phi}_2$  に対し、 $\hat{\mathcal{U}}(\vec{\phi}_1)\hat{\mathcal{U}}(\vec{\phi}_2) = \hat{\mathcal{U}}(\vec{\phi}_3)$  なる  $\vec{\phi}_3$  が存在
- 単位元： $\hat{\mathcal{U}}|_{|\vec{\phi}|=0}$
- 逆元： $\hat{\mathcal{U}}^{-1}(\vec{\phi}) = \hat{\mathcal{U}}(-\vec{\phi})$
- 結合則も満たされる（証明は省略）

## 角運動量の固有値と固有状態

角運動量演算子： $\hat{\vec{J}} = (\hat{J}_x, \hat{J}_y, \hat{J}_z) = (\hat{J}_1, \hat{J}_2, \hat{J}_3)$

- $[\hat{J}_x, \hat{J}_y] = i\hbar\hat{J}_z, \dots, \hat{J}^2 \equiv \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 + \hat{J}_z^2$   
 $\Rightarrow [\hat{J}_a, \hat{J}_b] = i\hbar\epsilon_{abc}\hat{J}_c$   
 $\Rightarrow [\hat{J}_a, \hat{J}^2] = 0$  with  $\hat{J}^2 \equiv \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 + \hat{J}_z^2$

まず、以下の演算子を定義： $\hat{j}_a \equiv \hbar^{-1}\hat{J}_a$

- $[\hat{j}_a, \hat{j}_b] = i\epsilon_{abc}\hat{j}_c$
- $[\hat{j}_a, \hat{j}^2] = 0$  with  $\hat{j}^2 \equiv \hat{j}_x^2 + \hat{j}_y^2 + \hat{j}_z^2$

同時対角化可能な演算子のセット： $\hat{j}^2, \hat{j}_z$

- $|K, \lambda\rangle$  を定義（with  $\langle K, \lambda|K, \lambda\rangle = 1$ ）  
 $\Rightarrow \hat{j}^2|K, \lambda\rangle = K|K, \lambda\rangle$   
 $\Rightarrow \hat{j}_z|K, \lambda\rangle = \lambda|K, \lambda\rangle$

さらに： $\hat{j}_{\pm} \equiv \hat{j}_x \pm i\hat{j}_y$

$\Rightarrow$  交換関係：

$$[\hat{j}_z, \hat{j}_+] = [\hat{j}_z, \hat{j}_x + i\hat{j}_y] = i(\hat{j}_y - i\hat{j}_x) = \hat{j}_+, \quad (2.1)$$

$$[\hat{j}_z, \hat{j}_-] = -\hat{j}_-, \quad (2.2)$$

$$[\hat{j}_+, \hat{j}_-] = 2\hat{j}_z, \quad (2.3)$$

$$[\hat{j}^2, \hat{j}_{\pm}] = 0 \quad (2.4)$$

$\hat{j}_{\pm}$ ：昇降演算子と呼ばれる

- $\hat{j}^2$  の固有値は変えない

$$\hat{j}^2(\hat{j}_\pm |K, \lambda\rangle) = \hat{j}_\pm \hat{j}^2 |K, \lambda\rangle = K(\hat{j}_\pm |K, \lambda\rangle)$$

- $\hat{j}_z$  の固有値を  $\pm 1$  変える： $\hat{j}_z \hat{j}_\pm - \hat{j}_\pm \hat{j}_z = \pm \hat{j}_\pm$

$$\hat{j}_z(\hat{j}_\pm |K, \lambda\rangle) = \hat{j}_\pm(\hat{j}_z \pm 1) |K, \lambda\rangle = (\lambda \pm 1)\hat{j}_\pm |K, \lambda\rangle$$

従って：

- $\hat{j}_+ |K, \lambda\rangle \equiv c_{K,\lambda} |K, \lambda + 1\rangle$

位相の任意性を用いて  $c_{K,\lambda}$  は実かつ正とする。

$$\Rightarrow \langle K, \lambda | \hat{j}_- = c_{K,\lambda} \langle K, \lambda + 1 |$$

- $\hat{j}_- |K, \lambda\rangle \equiv d_{K,\lambda} |K, \lambda - 1\rangle$

$c_{K,\lambda}$  と  $d_{K,\lambda}$  の関係： $\hat{j}_\pm^\dagger = \hat{j}_\mp$  を用いる

- $c_{K,\lambda} = \langle K, \lambda + 1 | \hat{j}_+ |K, \lambda\rangle = (\langle K, \lambda | \hat{j}_- |K, \lambda + 1\rangle)^* = d_{K,\lambda+1}^*$

$$\Rightarrow c_{K,\lambda} = d_{K,\lambda+1}$$

続いて、 $K$  と  $\lambda$  の関係：

- $\langle K, \lambda | \hat{j}^2 |K, \lambda\rangle = \langle K, \lambda | (\hat{j}_x^2 + \hat{j}_y^2) |K, \lambda\rangle + \lambda^2$

$$\text{注：} \langle K, \lambda | \hat{j}_x^2 |K, \lambda\rangle = \langle K, \lambda | \hat{j}_x^\dagger \hat{j}_x |K, \lambda\rangle \geq 0$$

$$\Rightarrow \lambda^2 \leq K : K \text{ を固定すると } \lambda \text{ に最大値が存在}$$

- 与えられた  $K$  に対する  $\lambda$  の最大値を  $j$  とする：

$$\Rightarrow |K, j + 1\rangle \sim \hat{j}_+ |K, j\rangle \text{ は存在しない。}$$

$$\Rightarrow c_{K,j} = 0$$

$[\hat{j}_+, \hat{j}_-] = 2\hat{j}_z$  を使うと  $c_{K,\lambda}$  が求められる：

$$\begin{aligned} \langle K, \lambda + 1 | 2\hat{j}_z |K, \lambda + 1\rangle &= 2(\lambda + 1) \\ &= \langle K, \lambda + 1 | (\hat{j}_+ \hat{j}_- - \hat{j}_- \hat{j}_+) |K, \lambda + 1\rangle \\ &= d_{K,\lambda+1}^2 - c_{K,\lambda+1}^2 \\ &= c_{K,\lambda}^2 - c_{K,\lambda+1}^2. \end{aligned}$$

従って

$$\begin{aligned}
c_{K,\lambda}^2 &= c_{K,\lambda+1}^2 + 2(\lambda + 1) \\
&= c_{K,\lambda+2}^2 + 2(\lambda + 1) + 2(\lambda + 2) \\
&= \cdots \\
&= c_{K,j}^2 + 2(\lambda + 1) + 2(\lambda + 2) + \cdots + 2j \\
&\quad \Downarrow \quad c_{K,j} = 0 \\
&= (j + \lambda + 1)(j - \lambda)
\end{aligned}$$

まとめると：

$$\begin{aligned}
c_{K,\lambda} &= \sqrt{(j + \lambda + 1)(j - \lambda)} = \sqrt{j(j + 1) - \lambda(\lambda + 1)} \\
d_{K,\lambda} &= \sqrt{(j + \lambda)(j - \lambda + 1)}
\end{aligned}$$

$c_{K,\lambda}$  がわかると、 $K$  と  $j$  の関係がわかる：

$$\begin{aligned}
K &= \langle K, \lambda | \hat{j}^2 | K, \lambda \rangle \\
&= \langle K, \lambda | \left[ \frac{1}{2}(\hat{j}_+ \hat{j}_- + \hat{j}_- \hat{j}_+) + \hat{j}_z^2 \right] | K, \lambda \rangle \\
&= \frac{1}{2} (c_{K,\lambda+1}^2 + c_{K,\lambda+1}^2) + \lambda^2 \\
&= j(j + 1)
\end{aligned}$$

従って  $K = j(j + 1)$

$\Rightarrow$  以下、 $\hat{j}^2$  の固有値を  $j$  で特徴づける： $|K, \lambda\rangle \rightarrow |j, \lambda\rangle$ 、 $c_{K,\lambda} \rightarrow c_{j,\lambda}$

$$\hat{j}^2 |j, \lambda\rangle = j(j + 1) |j, \lambda\rangle$$

$\hat{j}_z$  の固有値の最小値： $\lambda^2 \leq K = j(j + 1)$  より、 $\lambda$  には最小値も存在



$\lambda = j$   
 $\lambda = j-1$   
 $\lambda = j-2$   
 $\vdots$   
 $\lambda = j-(n-1)$   
 $\lambda = j-n$   
 $\lambda = j-(n+1)$  (crossed out)  
 存在しない

$d_{j,j-n} = \sqrt{(n+1)(2j-n)}$

- $\lambda$  に最小値が存在する条件：ある  $n$  に対して  $d_{j,j-n} = 0$

$|j, j\rangle$  に  $(n+1)$  回  $\hat{j}_-$  を作用すると、ゼロになる。

$\hat{j}_- |j, j-n\rangle = d_{j,j-n} |j, j-n-1\rangle$ 、つまり  $|j, j-(n+1)\rangle$  は存在しない。

- $d_{j,j-n} = \sqrt{(n+1)(2j-n)}$

$\Rightarrow j$ ：非負の整数か半奇数のみが許される

$\Rightarrow$  このとき、 $d_{j,-j} = 0$

まとめると：

- $\hat{j}^2$  の固有値は  $j(j+1)$ 、ただし  $j = \frac{1}{2} \times (\text{非負の整数})$

$\Rightarrow \hat{j}^2$  の固有値は  $j(j+1)\hbar^2$

- 決まった  $j$  に対し、 $\hat{j}_z$  の固有値は  $-j, -(j-1), \dots, (j-1), j$  という値を取りえる

$\Rightarrow (2j+1)$  個の独立な状態が存在

- $j$  (あるいは  $j\hbar$ ) は「角運動量の大きさ」と呼ばれる。

## 軌道角運動量

波動関数の 1 価性から、 $j$  は整数のみが許される。

- 球面調和関数： $Y_{\ell,m}(\theta, \phi) \simeq \langle \theta, \phi | \ell, m \rangle$

## (広い意味での) スピン角運動量

それぞれの素粒子は、固有の角運動量（スピン角運動量）を持つ：

- スピン 0：ヒッグス粒子、 $\pi$  粒子、...
- スピン  $\frac{1}{2}$ ：電子、陽子、ニュートリノ、...
- スピン 1：光子、 $W$ -粒子、 $Z$ -粒子、...

## 2.5 角運動量の合成

ふたつの可換な角運動量が存在する場合を考える：

- $\vec{J}^{(1)}$ 、 $\vec{J}^{(2)}$ 、with  $[J_a^{(1)}, J_b^{(2)}] = 0$
- 例：
  - 軌道角運動量と spin
  - ふたつの粒子の spin（束縛状態）
  - ...

- 対応する空間：

$$|\psi\rangle = |\psi^{(1)}\rangle \otimes |\psi^{(2)}\rangle \text{ with } \vec{J}^{(1)}|\psi\rangle = (\vec{J}^{(1)}|\psi^{(1)}\rangle) \otimes |\psi^{(2)}\rangle, \dots$$

- $\vec{J} \equiv \vec{J}^{(1)} + \vec{J}^{(2)}$ ：全角運動量

回転した状態：

$$\begin{aligned} |\psi\rangle' &= \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\vec{J}^{(1)}\vec{\phi}\right)|\psi^{(1)}\rangle \otimes \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\vec{J}^{(2)}\vec{\phi}\right)|\psi^{(2)}\rangle \\ &= \exp\left[-\frac{i}{\hbar}(\vec{J}^{(1)} + \vec{J}^{(2)})\vec{\phi}\right]|\psi^{(1)}\rangle \otimes |\psi^{(2)}\rangle \\ &= \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\vec{J}\vec{\phi}\right]|\psi^{(1)}\rangle \otimes |\psi^{(2)}\rangle \end{aligned}$$

$\hat{\vec{J}}$ 、 $\hat{\vec{J}}^{(1)}$ 、 $\hat{\vec{J}}^{(2)}$  は、全てこれまでの交換関係を満たす：

- $[\hat{J}_a^{(A)}, \hat{J}_b^{(A)}] = i\epsilon_{abc}\hat{J}_c^{(A)}$
- $[\hat{J}_a^{(1)}, \hat{J}_b^{(2)}] = 0$

- $[\hat{J}_a, \hat{J}_b] = i\epsilon_{abc}\hat{J}_c$

注： $\hat{J}^2$  と  $\hat{J}_a^{(A)}$  は非可換

$$\begin{aligned}\hat{J}^2 &= (\hat{J}^{(1)} + \hat{J}^{(2)})^2 = (\hat{J}^{(1)})^2 + (\hat{J}^{(2)})^2 + 2\hat{J}^{(1)}\hat{J}^{(2)} \\ \Rightarrow [\hat{J}_a^{(1)}, \hat{J}^2] &= [\hat{J}_a^{(1)}, 2\hat{J}_b^{(1)}\hat{J}_b^{(2)}] = 2i\epsilon_{abc}\hat{J}_b^{(2)}\hat{J}_c^{(1)} \neq 0\end{aligned}$$

可換な（同時対角化可能な）演算子の組：

1. Uncoupled representation:

$$\{(\hat{J}^{(1)})^2, \hat{J}_z^{(1)}, (\hat{J}^{(2)})^2, \hat{J}_z^{(2)}\} \Rightarrow |j_1, \lambda_1\rangle \otimes |j_2, \lambda_2\rangle \equiv |j_1, \lambda_1, j_2, \lambda_2\rangle$$

2. Coupled representation:

$$\{\hat{J}^2, \hat{J}_z, (\hat{J}^{(1)})^2, (\hat{J}^{(2)})^2\} \Rightarrow |j, \lambda, j_1, j_2\rangle$$

Coupled rep. の状態ベクトルは、uncoupled rep. の状態ベクトルの線形和で書ける。

$$|j, \lambda, j_1, j_2\rangle = \sum_{j'_1, \lambda_1, j'_2, \lambda_2} |j'_1, \lambda_1, j'_2, \lambda_2\rangle \langle j'_1, \lambda_1, j'_2, \lambda_2 | j, \lambda, j_1, j_2 \rangle$$

$\langle j'_1, \lambda_1, j'_2, \lambda_2 | j, \lambda, j_1, j_2 \rangle$  : Clebsch-Gordan (CG) 係数

CG 係数が non-zero の条件

- $j_1 = j'_1, j_2 = j'_2$
- $\lambda = \lambda_1 + \lambda_2 \Leftarrow \hat{J}_z = \hat{J}_z^{(1)} + \hat{J}_z^{(2)}$
- $(j_1 + j_2)$  と  $j$  は等しくなくても良い。

以下、 $j_1$  と  $j_2$  は固定して考える：

$$|j_1, \lambda_1\rangle \otimes |j_2, \lambda_2\rangle = |\lambda_1, \lambda_2\rangle_U$$

$$|j, \lambda, j_1, j_2\rangle = |j, \lambda\rangle_C$$



上の式から、 $|j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1\rangle_C$  が  $|j_1 - 1, j_2\rangle_U$  と  $|j_1, j_2 - 1\rangle_U$  の線型結合として得られる：

$$\begin{aligned} & |j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1\rangle_C \\ &= |j_1 - 1, j_2\rangle_U \textcolor{violet}{\langle j_1 - 1, j_2 | j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1 \rangle_C} \\ & \quad + |j_1, j_2 - 1\rangle_U \textcolor{violet}{\langle j_1, j_2 - 1 | j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1 \rangle_C} \end{aligned}$$

赤字の部分：CG 係数

- この操作を繰り返して、角運動量の大きさが  $j_1 + j_2$  の表現  $(2(j_1 + j_2) + 1)$  個の状態が構成できる。
- 続いて角運動量の大きさが  $j_1 + j_2 - 1$  の表現：まず  $\hat{j}_z$  の固有値が  $j_1 + j_2 - 1$  の状態が二つあることから出発。

- ひとつの線型結合は  $|j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1\rangle_C$
- それと直行する状態は  $|j_1 + j_2 - 1, j_1 + j_2 - 1\rangle_C$  (角運動量の大きさが  $j_1 + j_2 - 1$  の表現の  $\hat{j}_z$  最大の状態) を与える。

$$\begin{aligned} |j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1\rangle_C &= a |j_1 - 1, j_2\rangle_U + b |j_1, j_2 - 1\rangle_U \\ \Rightarrow |j_1 + j_2 - 1, j_1 + j_2 - 1\rangle_C &= b |j_1 - 1, j_2\rangle_U - a |j_1, j_2 - 1\rangle_U \end{aligned}$$

- $|j_1 + j_2 - 1, j_1 + j_2 - 1\rangle_C$  に  $\hat{j}_-$  を作用していくことで、角運動量の大きさが  $j_1 + j_2 - 1$  の表現が得られる。
- 続いて、角運動量の大きさが  $j_1 + j_2 - 2$  の表現を同様に作っていく。

可能な状態の数を考えてみる：ここでは  $j_1 > j_2$  (Table 4 参照)。

$\hat{j}^2$  の固有値を  $j(j + 1)$  として、 $j$  (全角運動量の大きさ) の取り得る値：

$$j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1, \dots, |j_1 - j_2|$$

角運動量の合成についてのまとめ：大きさが  $j_1$  と  $j_2$  のふたつの角運動量を合成したとき

- 全角運動量の大きさが  $j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1, \dots, |j_1 - j_2|$  の multiplet が一つずつ得られる。
- 合成後の状態の数：

$$N = [2(j_1 + j_2) + 1] + [2(j_1 + j_2 - 1) + 1] + \dots + [2|j_1 - j_2| + 1] = (2j_1 + 1)(2j_2 + 1)$$

$\hat{j}_z$ の固有値	状態の数	
$j_1 + j_2$	1	
$j_1 + j_2 - 1$	2	
$j_1 + j_2 - 2$	3	
...		
$j_1 - j_2$	$2j_2 + 1$	$\hat{j}_{2,-}$ を作用するとゼロとなる状態が現れる
$j_1 - j_2 - 1$	$2j_2 + 1$	
$j_1 - j_2 - 2$	$2j_2 + 1$	
...		
$j_2 - j_1$	$2j_2 + 1$	$\hat{j}_{1,-}$ を作用するとゼロとなる状態も現れる
$j_2 - j_1 - 1$	$2j_2$	
$j_2 - j_1 - 2$	$2j_2 - 1$	
...		
$-j_1 - j_2$	1	

Table 4:  $\hat{j}_z$  の固有値の取り得る値と、状態の数

### 角運動量の合成の例：二つのスピン $\frac{1}{2}$ 粒子の場合

二つのスピン  $\frac{1}{2}$  粒子 1 と 2 を考える（簡単のため軌道角運動量は無視）

⇒ それぞれのスピン演算子： $\hat{S}^{(1,2)}$

それぞれの粒子の取り得る状態： $\hat{S}_z^{(1,2)}$  の固有値が  $\pm\frac{1}{2}\hbar$  の状態

⇒  $|\pm\frac{1}{2}, \pm\frac{1}{2}\rangle_U$

⇒ 独立な状態は 4 つ（符号は独立に + と - を取り得る）

角運動量合成後の状態：

- 全角運動量の大きさ 1： $|1, +1\rangle_C$ 、 $|1, 0\rangle_C$ 、 $|1, -1\rangle_C$
- 全角運動量の大きさ 0： $|0, 0\rangle_C$

まず全角運動量の大きさ 1 について：

$$|1, +1\rangle_C = \left| +\frac{1}{2}, +\frac{1}{2} \right\rangle_U$$

両辺に  $\hat{j}_- \hat{s}_-^{(1)} + \hat{s}_-^{(2)}$  を作用：

$$\begin{aligned}\hat{j}_- |1, +1\rangle_C &= d_{1,1} |1, 0\rangle_C = \sqrt{2} |1, 0\rangle_C \\ &= (\hat{s}_-^{(1)} + \hat{s}_-^{(2)}) \left| +\frac{1}{2}, +\frac{1}{2} \right\rangle_U = \left| -\frac{1}{2}, +\frac{1}{2} \right\rangle_U + \left| +\frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle_U\end{aligned}$$

ここから、規格化された状態として

$$|1, 0\rangle_C = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \left| -\frac{1}{2}, +\frac{1}{2} \right\rangle_U + \left| +\frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle_U \right)$$

さらに上式に  $\hat{j}_-$  を作用して：

$$|1, -1\rangle_C = \left| -\frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle_U$$

続いて全角運動量の大きさ 0 について： $|1, 0\rangle_C$  との直交性から

$$|0, 0\rangle_C = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \left| -\frac{1}{2}, +\frac{1}{2} \right\rangle_U - \left| +\frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle_U \right)$$

## 水素原子：21cm 線

水素原子：電子と陽子の結合状態

- 電子も陽子もスピンの  $\frac{1}{2}$  の粒子
- 水素原子の  $n = 1$  状態（「基底状態」と呼んでいた状態）は 4 つの状態がある。

エネルギー固有状態は、全角運動量の固有状態（個々のスピン演算子の固有状態ではない）

- 全角運動量の大きさ = 0： $|0, 0\rangle_C$
- 全角運動量の大きさ = 1： $|1, -1\rangle_C, |1, 0\rangle_C, |1, +1\rangle_C$

全角運動量 0 の状態と 1 の状態の間には、エネルギー差があることが知られている：

$$\Delta E_{10} \simeq 5.8 \times 10^{-6} \text{ eV}$$

状態遷移に伴って、電磁波（光）が放出される：

光の波長：21.1 cm（21cm 線）

光の振動数：1420 MHz

遷移率（崩壊率）： $2.9 \times 10^{-15} \text{ sec}^{-1}$ （線幅が極めて小さい）

21cm 線は、天文学・初期宇宙論の観点からおもしろい。

## 2.6 行列を使った角運動量の表現

角運動量の大きさ  $j$  に対して、 $(2j+1)$  次元の独立な状態（基底）が存在。

$$|j, \lambda\rangle \text{ with } \lambda = -j, -(j-1), \dots, (j-1), j$$

$\Rightarrow$  空間回転はその基底で展開できる状態内で閉じる。

$\hat{j}_a$  に対応する  $(2j+1) \times (2j+1)$  行列を考えることができる：

$$\hat{j}_a \Leftrightarrow \tilde{j}_a$$

$$\tilde{j}_a = \begin{pmatrix} (\tilde{j}_a)_{j,j} & (\tilde{j}_a)_{j,j} & \cdots & (\tilde{j}_a)_{j,-j} \\ (\tilde{j}_a)_{j-1,j} & (\tilde{j}_a)_{j-1,j} & \cdots & (\tilde{j}_a)_{j-1,-j} \\ \cdots & & & \\ (\tilde{j}_a)_{-j,j} & (\tilde{j}_a)_{-j,j} & \cdots & (\tilde{j}_a)_{-j,-j} \end{pmatrix}$$

ただし、

$$(\tilde{j}_a)_{\lambda,\lambda'} \equiv \langle j, \lambda | \hat{j}_a | j, \lambda' \rangle$$

$\tilde{j}_a$  は対応する交換関係を満たす：

- $[\tilde{j}_a, \tilde{j}_b] = i\epsilon_{abc}\tilde{j}_c$
- $[\tilde{j}_a, \tilde{j}^2] = 0$  with  $\tilde{j}^2 \equiv \tilde{j}_x^2 + \tilde{j}_y^2 + \tilde{j}_z^2$

状態  $|\psi\rangle$  が  $|j, \lambda\rangle$  の線形和で表されるとして、その回転を考える。

- $|\psi\rangle = |j, \lambda\rangle \langle j, \lambda | \psi \rangle$

$\lambda$  の和は implicit

- 微小空間回転をして得られる状態：

$$\begin{aligned} |\psi'\rangle &= [1 - i\hat{j}_a(\delta\phi)_a] |\psi\rangle \\ &= |j, \lambda'\rangle \langle j, \lambda' | [1 - i\hat{j}_a(\delta\phi)_a] |j, \lambda\rangle \langle j, \lambda | \psi \rangle \\ &= |j, \lambda'\rangle [\delta_{\lambda',\lambda} - i(\tilde{j}_a)_{\lambda',\lambda}(\delta\phi)_a] \langle j, \lambda | \psi \rangle \end{aligned}$$

波動関数の回転に対する変換性：

$$\tilde{\psi} = \begin{pmatrix} \langle j, j | \psi \rangle \\ \langle j, j-1 | \psi \rangle \\ \langle j, j-2 | \psi \rangle \\ \cdots \\ \langle j, -j | \psi \rangle \end{pmatrix} \Rightarrow \tilde{\psi}' \simeq [1 - i\tilde{j}_a(\delta\phi)_a] \tilde{\psi}$$



有限の角度の回転については：

$$\tilde{\psi}' = \exp[-i\tilde{j}_a\phi_a] \tilde{\psi} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i)^n}{n!} [\tilde{j}_a\phi_a]^n \tilde{\psi} \quad (2.5)$$

行列の具体的表式： $\hat{j}_z$  の固有状態を基底に選んでいることに注意！

- $\tilde{j}_z$  は対角行列

$$\tilde{j}_z = \text{diag}(j, j-1, \dots, -j)$$

- $\tilde{j}_{\pm}$  は  $\tilde{j}_z$  の固有値を  $\pm 1$  変える

$$\tilde{j}_+ = \tilde{j}_-^\dagger = \begin{pmatrix} 0 & c_{j,j-1} & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & c_{j,j-2} & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ \cdots & & & & & & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & c_{j,-j} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

- $\tilde{j}_x$  と  $\tilde{j}_y$  は  $\tilde{j}_{\pm}$  から求められる：

$$\tilde{j}_x = \frac{1}{2}(\tilde{j}_+ + \tilde{j}_-), \quad \tilde{j}_y = \frac{1}{2i}(\tilde{j}_+ - \tilde{j}_-)$$

- $\tilde{j}^2$  は ( $\hat{j}^2$  の固有値を固定して考える限り) 単位行列に比例：

$$\tilde{j}^2 = j(j+1)\text{diag}(1, 1, \dots, 1)$$

- $\tilde{j}_x$ 、 $\tilde{j}_y$ 、 $\tilde{j}_z$  は全てエルミートな行列

**例 1：**  $j = 0$

最も簡単な場合： $j = 0$

- 状態の数：1 個
- 行列による表現：

$$\tilde{j}_x = \tilde{j}_y = \tilde{j}_z = (0)$$

この場合、状態は回転に対して不変。

例 2 :  $j = 1$

3次元ベクトル :  $j = 1$  に対応

- 状態の数 : 3 個
- 行列による表現 ( $\tilde{j}_a \rightarrow T_a$ ) :

$$T_x = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad T_y = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix} \quad T_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

例 3 :  $j = \frac{1}{2}$

(狭い意味での) スピン :  $j = \frac{1}{2}$

- 状態の数 : 2 個
- 行列による表現 ( $\tilde{j}_a \rightarrow \frac{1}{2}\sigma_a$ ) :

$$s_a = \frac{1}{2}\hbar\sigma_a \quad \text{with} \quad \sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$\sigma_a$  : パウリ行列 (Pauli matrices)

## 2.7 スピン $\frac{1}{2}$

$j = \frac{1}{2}$  の状態に対応した波動関数の回転に対する変換性 :

$$\tilde{\psi}' = \exp \left[ -i\frac{1}{2}\sigma_a\phi_a \right] \tilde{\psi}, \quad (\tilde{\psi}^\dagger)' = \tilde{\psi}^\dagger \exp \left[ i\frac{1}{2}\sigma_a\phi_a \right] \quad (2.6)$$

Pauli 行列の性質 :

- $\sigma_a$  はエルミートな行列
- 便利な公式いくつか :

$$[\sigma_a, \sigma_b] = 2i\epsilon_{abc}\sigma_c$$

$$\{\sigma_a, \sigma_b\} = 2\delta_{ab}$$

$$\exp [i\Theta_a\sigma_a] = \cos \Theta + i\hat{\Theta}_a\sigma_a \sin \Theta \quad \text{with} \quad \Theta = |\vec{\Theta}|, \quad \hat{\Theta} = \frac{1}{|\vec{\Theta}|}\vec{\Theta}$$

## スピン $\frac{1}{2}$ からベクトルを構成

以下：

$$|\pm\frac{1}{2}\rangle \equiv |s = \frac{1}{2}, s_z = \pm\frac{1}{2}\rangle$$

Eq. (2.6) のように回転する波動関数が2セットあるとする：

$$\tilde{\psi} = \begin{pmatrix} \langle +\frac{1}{2} | \psi \rangle \\ \langle -\frac{1}{2} | \psi \rangle \end{pmatrix}, \quad \tilde{\Psi} = \begin{pmatrix} \langle +\frac{1}{2} | \Psi \rangle \\ \langle -\frac{1}{2} | \Psi \rangle \end{pmatrix}$$

以下の量を定義：

$$S \equiv \tilde{\Psi}^\dagger \tilde{\psi}$$

$$V_a \equiv \tilde{\Psi}^\dagger \sigma_a \tilde{\psi}$$

すると：

- $S$  は回転に対して不変（これはすぐわかるので説明省略）
- $V_a$  は回転に対してベクトル的に変換

位置演算子の固有状態  $|\vec{a}\rangle$  を  $U|\vec{a}\rangle = |R\vec{a}\rangle$ （ただし  $R$  は回転を表す正規直行行列）と変換する回転演算子に対し、 $V'_a = R_{ab}^{-1}V_b$  となる（逆回転）。

簡単のため、回転軸が  $z$  軸方向を向いている場合について：

$$\vec{a}' = (a_x \cos \phi - a_y \sin \phi, a_x \sin \phi + a_y \cos \phi, a_z) \quad \Leftrightarrow \quad R = \begin{pmatrix} \cos \phi & -\sin \phi & 0 \\ \sin \phi & \cos \phi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

回転に対応したユニタリ行列：

$$U \equiv \exp \left[ -i\frac{1}{2}\sigma_z\phi \right] = \cos \frac{\phi}{2} - i\sigma_z \sin \frac{\phi}{2} \quad \Rightarrow \quad U^\dagger \equiv \exp \left[ i\frac{1}{2}\sigma_z\phi \right] = \cos \frac{\phi}{2} + i\sigma_z \sin \frac{\phi}{2}$$

すると  $V'$  は以下のように表される：

$$V'_a = \tilde{\Psi}^\dagger U^\dagger \sigma_a U \tilde{\psi}$$

ただし：

$$\begin{aligned}
 U^\dagger \sigma_x U &= \left[ \cos \frac{\phi}{2} - i \sigma_z \sin \frac{\phi}{2} \right] \sigma_x \left[ \cos \frac{\phi}{2} + i \sigma_z \sin \frac{\phi}{2} \right] \\
 &= \sigma_x \cos^2 \frac{\phi}{2} - i [\sigma_z, \sigma_x] \sin \frac{\phi}{2} \cos \frac{\phi}{2} + \sigma_z \sigma_x \sigma_z \sin^2 \frac{\phi}{2} \\
 &\quad \Downarrow \quad [\sigma_z, \sigma_x] = 2i\sigma_y, \quad \sigma_z \sigma_x \sigma_z = -\sigma_x \\
 &= \sigma_x \cos \phi + \sigma_y \sin \phi \\
 U^\dagger \sigma_y U &= -\sigma_x \sin \phi + \sigma_y \cos \phi \\
 U^\dagger \sigma_z U &= \sigma_z
 \end{aligned}$$

## 歳差運動

(多くの場合) スピンは磁場と相互作用

- スピンを持つ粒子は「磁気モーメント」を持つ

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

- 粒子固有の磁気モーメントはスピンと平行

$$\vec{\mu} = \frac{\mu}{S} \vec{S} \quad \mu \equiv |\vec{\mu}|$$

$$- \text{電子の場合 } (S = \frac{1}{2}\hbar) : \mu_e = \frac{e\hbar}{2m_e c} \times \left( 1 + \frac{\alpha}{2\pi} + \cdots \right) \simeq 5.8 \times 10^{-5} \text{ eV/G}$$

以下、電子 (スピン  $\frac{1}{2}$ ) について：

空間方向自由度はないとする (例えばエネルギー最低状態に束縛されている)

$$\hat{H} = -\mu_e \vec{B} \vec{\sigma}$$

$\vec{B}$  は外場

まず、定常的な磁場をかけた場合 (磁場の方向を  $z$  方向にとる)、かつエネルギー原点をずらす

$$\hat{H} = -2\mu_e B_0 \hat{s}_z + \mu_e B_0 = -\mu_e B_0 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} + \mu_e B_0 \equiv \hbar\omega_0 \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\hbar\omega_0 = 2\mu_e B_0$$

$\Rightarrow \left| +\frac{1}{2} \right\rangle$  と  $\left| -\frac{1}{2} \right\rangle$  のエネルギーに差がでる

- 基底状態 (ground state) :  $|g\rangle = |+\frac{1}{2}\rangle$  (エネルギー 0)
- 励起状態 (excited state) :  $|e\rangle = |-\frac{1}{2}\rangle$  (エネルギー  $\hbar\omega_0$ )

この場合のスピン歳差運動：

$$|\psi(t)\rangle = f_g(t) |g\rangle + f_e(t) e^{-i\omega_0 t} |e\rangle.$$

Schrödinger 方程式：

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle &= i\hbar \left[ \dot{f}_g |g\rangle + (\dot{f}_e - i\omega_0 f_e) e^{-i\omega_0 t} |e\rangle \right] \\ &= \hat{H} |\psi(t)\rangle \\ &= \frac{1}{2} \hbar \omega_0 (-2\hat{s}_z + 1) [f_g |g\rangle + f_e e^{-i\omega_0 t} |e\rangle] \\ &\quad \Downarrow \quad 2\hat{s}_z |g\rangle = |g\rangle, \quad 2\hat{s}_z |e\rangle = -|e\rangle \\ &= \hbar \omega_0 f_e e^{-i\omega_0 t} |e\rangle \end{aligned}$$

$|g\rangle$  と  $|e\rangle$  が独立な状態なので：

$$\dot{f}_g = \dot{f}_e = 0 \quad \Rightarrow \quad \dot{f}_g(t) = a_g, \quad \dot{f}_e = a_e \quad (\text{それぞれ定数})$$

例 1 :  $a_g = 1$ 、 $a_e = 0$

- $\langle \hat{s}_z \rangle(t) \equiv \langle \psi(t) | \hat{s}_z | \psi \rangle = \frac{1}{2}$
- $\langle \hat{s}_{x,y} \rangle(t) \equiv \langle \psi(t) | \hat{s}_{x,y} | \psi \rangle = 0$

例 2 :  $a_g = a_e = \frac{1}{\sqrt{2}}$

- $|\psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|g\rangle + e^{-i\omega_0 t} |e\rangle)$
- $\langle \hat{s}_x \rangle(t) = \frac{1}{2} \cos \omega_0 t$
- $\langle \hat{s}_y \rangle(t) = -\frac{1}{2} \sin \omega_0 t$

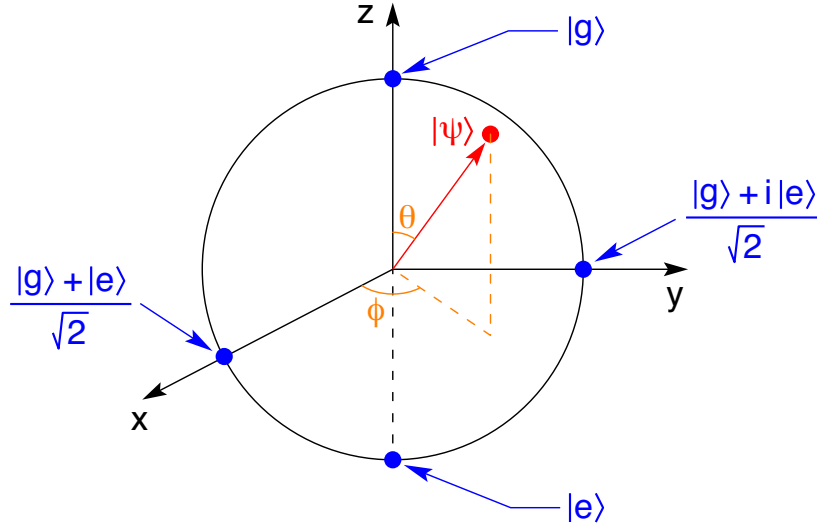
Bloch 球：2 準位系の状態を球上の点として表す

- $|\psi\rangle = \cos \frac{\theta}{2} |g\rangle + e^{i\phi} \sin \frac{\theta}{2} |e\rangle \quad \text{with } 0 \leq \theta \leq \pi, \quad 0 \leq \phi < 2\pi$
- 状態全体にかかる位相は非物理的であることを使い、 $|g\rangle$  の前の係数は実にとる  
 $|\psi\rangle = \cos \theta |g\rangle + e^{i\phi} \sin \theta |e\rangle \quad \text{with } 0 \leq \theta \leq \pi, \quad 0 \leq \phi < 2\pi \text{ ではない!}$

$$\Leftrightarrow |\pi - \theta, \phi + \pi\rangle = -|\theta, \phi\rangle$$

- $z$  方向を向いた定常磁場での歳差運動：Bloch 球の上の歳差運動

$$\theta(t) = \theta(0), \quad \phi(t) = -\omega_0 t$$



Notice :  $\hat{\sigma} \equiv 2\hat{s}$  の期待値は Bloch 球上の座標

$$\langle \psi | \hat{\sigma} | \psi \rangle = (\langle \psi | \hat{\sigma}_x | \psi \rangle, \langle \psi | \hat{\sigma}_y | \psi \rangle, \langle \psi | \hat{\sigma}_z | \psi \rangle) = (\sin \theta \cos \phi, \sin \theta \sin \phi, \cos \theta)$$

続いて（定常磁場に加えて） $x$  方向に振動磁場を加えてみる：

$$\hat{H} = \hbar \omega_0 \left( \hat{s}_z - \frac{1}{2} \right) - 4\eta \sin \omega_1 t \hat{s}_x$$

$$\Downarrow \quad 2\hat{s}_x |g\rangle = |e\rangle, \quad 2\hat{s}_x |e\rangle = |g\rangle, \quad |\psi(t)\rangle = f_g(t) |g\rangle + f_e(t) e^{-i\omega_0 t} |e\rangle$$

$$\dot{f}_g = 2i\eta e^{-i\omega_0 t} \sin \omega_1 t f_e, \quad \dot{f}_e = 2i\eta e^{i\omega_0 t} \sin \omega_1 t f_g$$

$$\Downarrow \quad \sin \omega_1 t = \frac{1}{2i} (e^{i\omega_1 t} - e^{-i\omega_1 t})$$

$$\dot{f}_g = \eta (e^{-i(\omega_0 - \omega_1)t} - e^{-i(\omega_0 + \omega_1)t}) f_e$$

$$\dot{f}_e = \eta (e^{i(\omega_0 + \omega_1)t} - e^{i(\omega_0 - \omega_1)t}) f_g$$

$\eta \ll \omega_0, \omega_1$  の場合を考える：

- $f_{g,e}$  の変化のタイムスケール： $\sim \eta^{-1}$

- $e^{i(\omega_0 \pm \omega_1)t}$  の変化のタイムスケールが早いと、平均してゼロ

$\eta \ll |\omega_0 \pm \omega_1|$  の場合：

- $f_{g,e}$  はほぼ一定

$\omega_0 = \omega_1$  の場合、振動項を無視して（回転波近似）：

$$\dot{f}_g \simeq \eta f_e, \quad \dot{f}_e \simeq -\eta f_g$$

これを解いて：

$$f_g(t) \simeq f_g(0) \cos \eta t + f_e(0) \sin \eta t$$

$$f_e(t) \simeq f_e(0) \cos \eta t - f_g(0) \sin \eta t$$

例えば  $f_g(0) = 1$ 、 $f_e(0) = 0$  のとき：

$$f_g(t) \simeq \cos \eta t, \quad f_e(t) \simeq -\sin \eta t$$

数値的に計算してみた結果は、Fig. 4 参照。

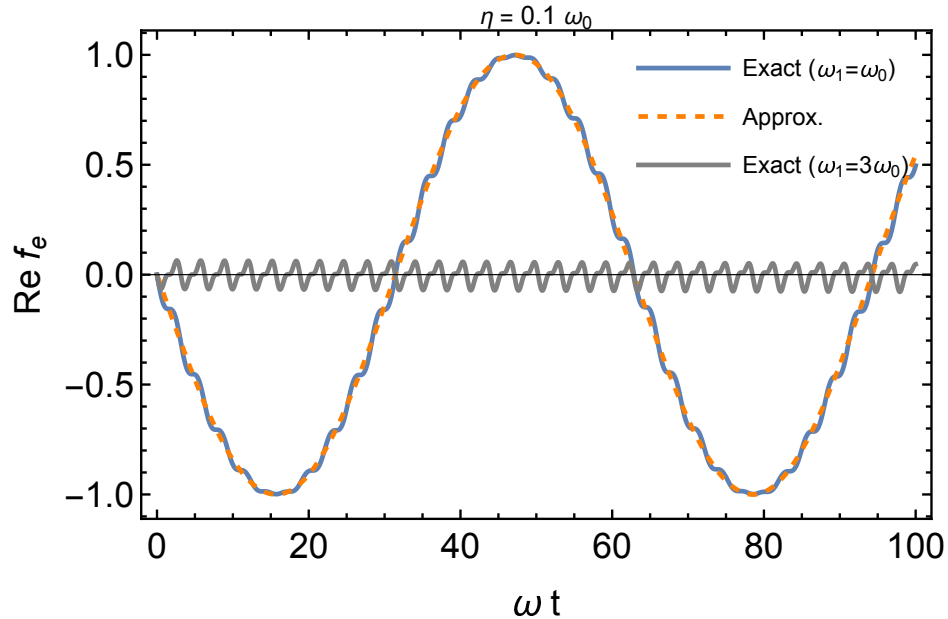


Figure 4: スピン歳差運動の振る舞い。数値計算の結果と近似式との比較。  $f_g(0) = 1$ 。

### 3 摂動論

#### 3.1 時間によらない摂動論 I：縮退がない場合

ここでは、厳密に解くことはできない場合に、近似的に波動関数やエネルギー固有関数を求める手法を学ぶ：

- 系のハミルトニアンが以下のように表される：

$$\hat{H} = \hat{H}^{(0)} + \hat{H}^{(1)}$$

$\hat{H}^{(0)}$ ：固有状態が厳密に求まる（調和振動子、 $\frac{1}{r}$  ポテンシャル、…）

$\hat{H}^{(1)}$ ：微小で摂動として扱うことができる（通常微小パラメータに比例）

- 近似的には、エネルギー固有状態は  $\hat{H}^{(0)}$  の固有状態で近似できる。

⇒  $\hat{H}^{(1)}$  の効果を order-by-order に入れていく。

出発点： $\hat{H}^{(0)}$  の固有値と固有状態はわかっているものとする

- 固有値のセット  $\{E_n^{(0)}\}$ 、固有関数  $\{|\varphi_n^{(0)}\rangle\}$

$$\begin{aligned}\hat{H}^{(0)} |\varphi_n^{(0)}\rangle &= E_n^{(0)} |\varphi_n^{(0)}\rangle \\ \langle \varphi_n^{(0)} | \varphi_{n'}^{(0)} \rangle &= \delta_{n,n'}\end{aligned}$$

- $\hat{H}^{(0)}$  の固有状態は完全系をなす。

$$\sum_n |\varphi_n^{(0)}\rangle \langle \varphi_n^{(0)}| = 1.$$

⇒ 任意の状態は  $\hat{H}^{(0)}$  の固有状態の線形和として表される。

まず、 $\hat{H}^{(0)}$  の固有値に縮退がない場合を考える：

⇒  $\{E_n^{(0)}\}$  は全て異なる

摂動的扱いが見やすいように、以下のハミルトニアンから出発（実際は  $\lambda \rightarrow 1$ ）

$$\hat{H} = \hat{H}^{(0)} + \lambda \hat{H}^{(1)}$$

本当に欲しいもの： $\hat{H}$  の固有値と固有関数

$$\begin{aligned}\hat{H} |\varphi_n\rangle &= E_n |\varphi_n\rangle \\ \langle \varphi_n | \varphi_{n'} \rangle &= \delta_{n,n'}\end{aligned}$$

このあとは記法の簡略化のため：



$$|\phi_n\rangle = |\varphi_n^{(0)}\rangle$$

ハミルトニアンの固有値と固有関数は、 $\lambda$  のべき級数で表される（はず）

- $E_n = E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \dots$
- $|\varphi_n\rangle = |\varphi_n^{(0)}\rangle + \lambda |\varphi_n^{(1)}\rangle + \lambda^2 |\varphi_n^{(2)}\rangle + \dots$

$|\varphi_n^{(p)}\rangle$  は  $|\varphi_n^{(0)}\rangle$  の線形和で表される。

$$\Rightarrow |\varphi_n\rangle = |\varphi_n^{(0)}\rangle + \sum_{p=1}^{\infty} \lambda^p \left( \sum_k C_{nk}^{(p)} |\varphi_k^{(0)}\rangle \right)$$

- $E_n^{(p)}$  と  $C_{nk}^{(p)}$  が求めるべき量

## 固有値方程式

$$\begin{aligned} & (\hat{H}^{(0)} + \lambda \hat{H}^{(1)}) \left[ |\varphi_n^{(0)}\rangle + \lambda \sum_k C_{nk}^{(1)} |\varphi_k^{(0)}\rangle + \lambda^2 \sum_k C_{nk}^{(2)} |\varphi_k^{(0)}\rangle + \dots \right] \\ &= (E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \dots) \left[ |\varphi_n^{(0)}\rangle + \lambda \sum_k C_{nk}^{(1)} |\varphi_k^{(0)}\rangle + \lambda^2 \sum_k C_{nk}^{(2)} |\varphi_k^{(0)}\rangle + \dots \right] \end{aligned}$$

上の方程式を、 $\lambda$  の次数が低い方から解いていく：

- $\lambda^0$ ：これは自動的に満たされる。

$$\hat{H}^{(0)} |\phi_n\rangle = E_n^{(0)} |\phi_n\rangle$$

- $\lambda^1$ ：

$$\hat{H}^{(1)} |\phi_n\rangle + \hat{H}^{(0)} \sum_k C_{nk}^{(1)} |\phi_k\rangle = E_n^{(1)} |\phi_n\rangle + E_n^{(0)} \sum_k C_{nk}^{(1)} |\phi_k\rangle$$

- $\lambda^2$ ：

$$\begin{aligned} & \hat{H}^{(1)} \sum_k C_{nk}^{(1)} |\phi_k\rangle + \hat{H}^{(0)} \sum_k C_{nk}^{(2)} |\phi_k\rangle = \hat{H}^{(1)} \sum_k C_{nk}^{(1)} |\phi_k\rangle + \sum_k C_{nk}^{(2)} E_k^{(0)} |\phi_k\rangle \\ &= E_n^{(2)} |\phi_n\rangle + E_n^{(1)} \sum_k C_{nk}^{(1)} |\phi_k\rangle + E_n^{(0)} \sum_k C_{nk}^{(2)} |\phi_k\rangle \end{aligned}$$

まず  $O(\lambda)$

- $O(\lambda)$  を変形して

$$\left(\hat{H}^{(1)} - E_n^{(1)}\right) |\phi_n\rangle = \sum_k C_{nk}^{(1)} \left(E_n^{(0)} - E_k^{(0)}\right) |\phi_k\rangle \quad (3.1)$$

状態の直交性を用いて、 $E_n^{(1)}$  と  $C_{nk}^{(1)}$  を求める

$$\langle \phi_n | \phi_k \rangle = \delta_{nk}$$

- $\langle \phi_n | \times (3.1) : \text{RHS} = 0$

$$\langle \phi_n | \left(\hat{H}^{(1)} - E_n^{(1)}\right) |\phi_n\rangle = 0 \quad \Rightarrow \quad E_n^{(1)} = \langle \phi_n | \hat{H}^{(1)} | \phi_n \rangle$$

摂動の1次では、エネルギーの変化は  $\hat{H}^{(1)}$  の期待値で与えられる

- $\langle \phi_l | \times (3.1)$  with  $l \neq n$

$$\langle \phi_l | \hat{H}^{(1)} | \phi_n \rangle = C_{nl}^{(1)} (E_n^{(0)} - E_l^{(0)}) \quad \Rightarrow \quad C_{nl}^{(1)} = \frac{\langle \phi_l | \hat{H}^{(1)} | \phi_n \rangle}{E_n^{(0)} - E_l^{(0)}}$$

- $C_{nn}^{(1)}$  は Eq. (3.1) からは決まらない

$\Rightarrow C_{nn}^{(1)}$  は状態が正しく規格化されるように決定。

$$\begin{aligned} \langle \phi_n | \phi_n \rangle &= |1 + \lambda C_{nn}^{(1)}|^2 \langle \phi_n | \phi_n \rangle + \lambda^2 \sum_{k \neq n} |C_{nk}^{(1)}|^2 \langle \phi_k | \phi_k \rangle + \dots \\ &= 1 + 2\lambda \text{Re} C_{nn}^{(1)} + O(\lambda^2) \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \text{Re} C_{nn}^{(1)} = 0$$

$\Rightarrow \text{Im} C_{nn}$  は状態の位相の自由度に対応して決まらない ( $\text{Im} C_{nn} = 0$  とするのが簡単)

続いて、 $O(\lambda^2)$

$$E_n^{(2)} |\phi_n\rangle = \sum_k C_{nk}^{(1)} (\hat{H}^{(1)} - E_n^{(1)}) |\phi_k\rangle + \sum_k C_{nk}^{(2)} (E_k^{(0)} - E_n^{(0)}) |\phi_k\rangle \quad (3.2)$$

- $\langle \phi_n | \times (3.2)$

$\Rightarrow$  RHS 第1項、 $k = n$  は  $E_n^{(1)} = \langle \phi_n | \hat{H}^{(1)} | \phi_n \rangle$  より効かない

$\Rightarrow$  RHS 第2項はゼロ

$$E_n^{(2)} = \sum_{k \neq n} C_{nk}^{(1)} \langle \phi_n | \hat{H}^{(1)} | \phi_k \rangle = \sum_{k \neq n} \frac{\langle \phi_k | \hat{H}^{(1)} | \phi_n \rangle \langle \phi_n | \hat{H}^{(1)} | \phi_k \rangle}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} = \sum_{k \neq n} \frac{|\langle \phi_n | \hat{H}^{(1)} | \phi_k \rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}$$

- $\langle \phi_l | \times (3.2)$  with  $l \neq n$

$$0 = \sum_k C_{nk}^{(1)} \langle \phi_l | \hat{H}^{(1)} | \phi_k \rangle - C_{nl}^{(1)} E_n^{(1)} + C_{nl}^{(2)} (E_l^{(0)} - E_n^{(0)})$$

これを解いて

$$\begin{aligned} C_{nl}^{(2)} &= \frac{1}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} \left[ \sum_k C_{nk}^{(1)} \langle \phi_l | \hat{H}^{(1)} | \phi_k \rangle - C_{nl}^{(1)} E_n^{(1)} \right] \\ &= \frac{C_{nn}^{(1)} \langle \phi_l | \hat{H}^{(1)} | \phi_n \rangle}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} + \sum_{k \neq n} \frac{\langle \phi_l | \hat{H}^{(1)} | \phi_k \rangle \langle \phi_k | \hat{H}^{(1)} | \phi_n \rangle}{(E_n^{(0)} - E_k^{(0)})(E_n^{(0)} - E_l^{(0)})} - \frac{\langle \phi_l | \hat{H}^{(1)} | \phi_n \rangle \langle \phi_n | \hat{H}^{(1)} | \phi_n \rangle}{(E_n^{(0)} - E_l^{(0)})^2} \end{aligned}$$

初項は  $C_{nn}^{(1)}$  の不定性に起因

- $C_{nn}^{(2)}$  は状態の規格化条件から決める（一般にはゼロにできない）。

例：調和振動子

$$\hat{H} = \hat{H}^{(0)} + \hat{H}^{(1)} \quad (3.3)$$

with

$$\hat{H}^{(0)} = \frac{1}{2m} \hat{p}^2 + \frac{1}{2} m \omega^2 \hat{x}^2, \quad \hat{H}^{(1)} = \frac{1}{2} \epsilon m \omega^2 \hat{x}^2 \quad (3.4)$$

$\hat{H}^{(0)}$  の固有値、固有状態

- $|\phi_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (\hat{a}^\dagger)^n |0\rangle$

生成消滅演算子： $\hat{H}^{(0)}$  のパラメータで構成

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}} \left[ \sqrt{m\omega} \hat{x} + \frac{i}{\sqrt{m\omega}} \hat{p} \right], \quad \hat{a}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}} \left[ \sqrt{m\omega} \hat{x} - \frac{i}{\sqrt{m\omega}} \hat{p} \right]$$

- $E_n^{(0)} = \left( n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega$

$\hat{H}$  の固有値は  $\omega \rightarrow (1 + \epsilon)^{1/2} \omega$  で求まるはず

- $E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar(1 + \epsilon)^{1/2} \omega = E_n^{(0)} + \frac{1}{2} \epsilon E_n^{(0)} + (\epsilon^2)$

これが摂動論の議論で再現されるかを確認する。

ここで

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

を使って

$$\hat{H}^{(1)} = \frac{1}{2} \epsilon m \omega^2 \hat{x}^2 = \frac{1}{4} \epsilon \hbar \omega [\hat{a}^2 + (\hat{a}^\dagger)^2 + \hat{a} \hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger \hat{a}] = \frac{1}{4} \epsilon \hbar \omega [\hat{a}^2 + (\hat{a}^\dagger)^2 + 2\hat{N} + 1]$$

$\hat{N} = \hat{a}^\dagger \hat{a}$ : Number operator

従って  $O(\epsilon)$  のエネルギーのシフトは：

$$E_n^{(1)} = \langle \phi_n | \hat{H}^{(1)} | \phi_n \rangle = \frac{1}{4} \epsilon \hbar \omega \langle \phi_n | (2\hat{N} + 1) | \phi_n \rangle = \frac{1}{2} \epsilon \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega$$

### 3.2 時間によらない摂動論 II：縮退がある場合

続いて、摂動を加える前のハミルトニアンが同じエネルギー固有値の固有状態を複数持つ場合を考える：

- $\hat{H}^{(0)} |\phi_{n,\alpha}\rangle = E_n^{(0)} |\phi_{n,\alpha}\rangle \quad (\alpha = 1, 2, \dots, N_n)$
- $\langle \phi_{n,\alpha} | \phi_{n',\alpha'} \rangle = \delta_{nn'} \delta_{\alpha\alpha'}$

注： $|\phi_{n,\alpha}\rangle$  の  $\alpha$  についての線形和も  $\hat{H}^{(0)}$  の固有状態

- $\hat{H}^{(0)} \left( \sum_{\alpha} a_{\alpha} |\phi_{n,\alpha}\rangle \right) = E_n^{(0)} \left( \sum_{\alpha} a_{\alpha} |\phi_{n,\alpha}\rangle \right)$

一般には、縮退した状態をユニタリ行列をつかって基底を取り直すことが可能：

$$|\phi'_{n,\alpha}\rangle = \sum_{\beta} U_{\alpha,\beta} |\phi_{n,\beta}\rangle$$

$$\Rightarrow \langle \phi'_{n,\alpha} | \phi'_{n,\beta} \rangle = \delta_{\alpha,\beta}$$

以下、摂動がエネルギーの縮退に与える影響を調べる。

$|\psi\rangle$  が  $\hat{H} = \hat{H}^{(0)} + \lambda\hat{H}^{(1)}$  の固有状態とする：

$$\begin{aligned} & (\hat{H}^{(0)} + \lambda\hat{H}^{(1)}) \left( \sum_{\alpha} a_{\alpha} |\phi_{n,\alpha}\rangle + \sum_{k \neq n} \lambda c_k |\phi_k\rangle + O(\lambda^2) \right) \\ &= (E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \dots) \left( \sum_{\alpha} a_{\alpha} |\phi_{n,\alpha}\rangle + \sum_{k \neq n} \lambda c_k |\phi_k\rangle + O(\lambda^2) \right) \end{aligned}$$

$O(\lambda)$  の項：

$$\begin{aligned} & \hat{H}^{(1)} \sum_{\alpha} a_{\alpha} |\phi_{n,\alpha}\rangle + \hat{H}^{(0)} \sum_{k \neq n} c_k |\phi_k\rangle = E_n^{(1)} \sum_{\alpha} a_{\alpha} |\phi_{n,\alpha}\rangle + E_n^{(0)} \sum_{k \neq n} c_k |\phi_k\rangle \\ \Rightarrow & \hat{H}^{(1)} \sum_{\alpha} a_{\alpha} |\phi_{n,\alpha}\rangle + \sum_{k \neq n} c_k E_k^{(0)} |\phi_k\rangle = E_n^{(1)} \sum_{\alpha} a_{\alpha} |\phi_{n,\alpha}\rangle + E_n^{(0)} \sum_{k \neq n} c_k |\phi_k\rangle \quad (3.5) \end{aligned}$$

Eq. (3.5) と  $\langle\phi_{n,\beta}|$  の内積を取る：

$$\sum_{\alpha} \langle\phi_{n,\beta}|\hat{H}^{(1)}|\phi_{n,\alpha}\rangle a_{\alpha} = E_n^{(1)} a_{\beta}$$

行列で書くと：

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_n^{(1)} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \dots \\ a_{N_n} \end{pmatrix} &\equiv \begin{pmatrix} \langle\phi_{n,1}|\hat{H}^{(1)}|\phi_{n,1}\rangle & \langle\phi_{n,1}|\hat{H}^{(1)}|\phi_{n,2}\rangle & \dots & \langle\phi_{n,1}|\hat{H}^{(1)}|\phi_{n,N_n}\rangle \\ \langle\phi_{n,2}|\hat{H}^{(1)}|\phi_{n,1}\rangle & \langle\phi_{n,2}|\hat{H}^{(1)}|\phi_{n,2}\rangle & \dots & \langle\phi_{n,2}|\hat{H}^{(1)}|\phi_{n,N_n}\rangle \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \langle\phi_{n,N_n}|\hat{H}^{(1)}|\phi_{n,1}\rangle & \langle\phi_{n,N_n}|\hat{H}^{(1)}|\phi_{n,2}\rangle & \dots & \langle\phi_{n,N_n}|\hat{H}^{(1)}|\phi_{n,N_n}\rangle \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \dots \\ a_{N_n} \end{pmatrix} \\ &= E_n^{(1)} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \dots \\ a_{N_n} \end{pmatrix} \end{aligned}$$

従って：

- $E_n^{(1)}$  は行列  $\mathcal{H}_n^{(1)}$  の固有値  
 $\Rightarrow$  行列  $\mathcal{H}_n^{(1)}$  が異なった固有値を持てば縮退は解ける
- $a_{n,\alpha}$  は行列  $\mathcal{H}_n^{(1)}$  の固有ベクトル
- $c_{\ell}$  は Eq. (3.5) と  $\langle\phi_{\ell}|$  の内積を取れば求まる。

$$c_{\ell} = \sum_{\alpha} \frac{a_{\alpha} \langle\phi_{\ell}|\hat{H}^{(1)}|\phi_{n,\alpha}\rangle}{E_n^{(0)} - E_{\ell}^{(0)}}$$

例：2次元調和振動子

$$\hat{H} = \hat{H}^{(0)} + \hat{H}^{(1)}$$

with

$$\hat{H}^{(0)} = \frac{1}{2m}(\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2) + \frac{1}{2}m\omega^2(\hat{x}^2 + \hat{y}^2), \quad \hat{H}^{(1)} = \epsilon m\omega^2 \hat{x}\hat{y}$$

それぞれに対する生成消滅演算子：

$$\hat{a}_i = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}} \left[ \sqrt{m\omega} \hat{x}_i + \frac{i}{\sqrt{m\omega}} \hat{p}_i \right], \quad \hat{a}_i^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}} \left[ \sqrt{m\omega} \hat{x}_i - \frac{i}{\sqrt{m\omega}} \hat{p}_i \right], \quad \text{with } i = x, y$$

すると

$$\hat{H}^{(0)} = (\hat{a}_x^\dagger \hat{a}_x + \hat{a}_y^\dagger \hat{a}_y + 1) \hbar\omega \quad (3.6)$$

$$\hat{H}^{(1)} = \frac{1}{2} \epsilon \hbar\omega (\hat{a}_x + \hat{a}_x^\dagger)(\hat{a}_y + \hat{a}_y^\dagger) \quad (3.7)$$

たとえば第1励起状態についての縮退：

$$|1, x\rangle \equiv \hat{a}_x^\dagger |0\rangle, \quad |1, y\rangle \equiv \hat{a}_y^\dagger |0\rangle$$

この基底で

$$\mathcal{H}_1^{(1)} = \frac{1}{2} \epsilon \hbar\omega \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

この固有値：

$$E^{(1)} = \pm \frac{1}{2} \epsilon \hbar\omega$$

エネルギー固有値は（摂動の1次で）以下の二つに分裂：

$$E_\pm^{(1)} \simeq \left( 2 \pm \frac{1}{2} \epsilon \right) \hbar\omega$$

ちなみに本当は、ハミルトニアンは対角化できる：

$$\hat{x} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{x}' - \hat{y}'), \quad \hat{y} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{x}' + \hat{y}')$$

すると

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}((\hat{p}'_x)^2 + (\hat{p}'_y)^2) + \frac{1}{2}m\omega^2(1+\epsilon)(\hat{x}')^2 + \frac{1}{2}m\omega^2(1-\epsilon)(\hat{y}')^2$$

したがって、振動数が  $\sqrt{1 \pm \epsilon}\omega$  の調和振動子系と同じ。

### 3.3 時間による摂動

#### 相互作用表示

摂動項が（一般には）時間による場合： $\hat{H} = \hat{H}^{(0)} + \hat{H}^{(1)}$

$\hat{H}^{(0)}$ ：固有状態が厳密に求まる（時間によらないとする）

$\hat{H}^{(1)}$ ：時間に依存した摂動項

状態の時間発展（Schrödinger picture）

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle = (\hat{H}^{(0)} + \hat{H}^{(1)}) |\psi(t)\rangle$$

相互作用表示：

- $\hat{\mathcal{O}}_I = e^{i\hat{H}^{(0)}t/\hbar} \hat{\mathcal{O}}_S e^{-i\hat{H}^{(0)}t/\hbar}$
- $|\psi\rangle_I = e^{i\hat{H}^{(0)}t/\hbar} |\psi\rangle_S$

演算子と状態の時間発展を  $\hat{H}^{(0)}$  を使って Schrödinger 表示からずらす

$\hat{H}^{(0)}$  は Schrödinger 表示と相互作用表示で変わらない

相互作用表示と Schrödinger 表示とで、対応する「期待値」は同じ

- $U \equiv e^{i\hat{H}^{(0)}t/\hbar}$  として：

$$\left[ \langle \psi' | \hat{\mathcal{O}} | \psi \rangle \right]_I = \langle \psi' |_S U^\dagger U \hat{\mathcal{O}}_S U^\dagger U | \psi \rangle = \left[ \langle \psi' | \hat{\mathcal{O}} | \psi \rangle \right]_S$$

相互作用表示における状態の時間発展：

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle_S = (\hat{H}_S^{(0)} + \hat{H}_S^{(1)}) |\psi(t)\rangle_S$$

から出発。

$$\begin{aligned} (\text{LHS}) &= i\hbar \frac{d}{dt} \left[ e^{-i\hat{H}^{(0)}t/\hbar} |\psi\rangle_I \right] = i\hbar e^{-i\hat{H}^{(0)}t/\hbar} \left[ -\frac{i}{\hbar} \hat{H}^{(0)} + \frac{d}{dt} \right] |\psi\rangle_I \\ (\text{RHS}) &= (\hat{H}_S^{(0)} + \hat{H}_S^{(1)}) \left[ e^{-i\hat{H}^{(0)}t/\hbar} |\psi\rangle_I \right] \end{aligned}$$

従って：

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi\rangle_I = \hat{H}_I^{(1)}(t) |\psi(t)\rangle_I \quad \text{with} \quad \hat{H}_I^{(1)} = e^{i\hat{H}^{(0)}t/\hbar} \hat{H}_S^{(1)} e^{-i\hat{H}^{(0)}t/\hbar} \quad (3.8)$$

Formal solution:

$$|\psi(t)\rangle_I = \sum_{p=0}^{\infty} \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \cdots \int_0^{t_{p-1}} dt_p \left[ \frac{1}{i\hbar} \hat{H}_I^{(1)}(t_1) \right] \left[ \frac{1}{i\hbar} \hat{H}_I^{(1)}(t_2) \right] \cdots \left[ \frac{1}{i\hbar} \hat{H}_I^{(1)}(t_p) \right] |\psi(0)\rangle_I \quad (3.9)$$

上の状態が Eq. (3.8) を満たすことはすぐわかる：

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \cdots \int_0^{t_{p-1}} dt_p \left[ \frac{1}{i\hbar} \hat{H}_I^{(1)}(t_1) \right] \left[ \frac{1}{i\hbar} \hat{H}_I^{(1)}(t_2) \right] \cdots \left[ \frac{1}{i\hbar} \hat{H}_I^{(1)}(t_p) \right] |\psi(0)\rangle_I \\ = \left[ \frac{1}{i\hbar} \hat{H}_I^{(1)}(t) \right] \int_0^t dt_2 \cdots \int_0^{t_{p-1}} dt_p \left[ \frac{1}{i\hbar} \hat{H}_I^{(1)}(t_2) \right] \cdots \left[ \frac{1}{i\hbar} \hat{H}_I^{(1)}(t_p) \right] |\psi(0)\rangle_I \end{aligned}$$

“Time ordering”：演算子を時間順に並べる操作

$$T \left[ \hat{\mathcal{O}}_1(t_1) \hat{\mathcal{O}}_2(t_2) \cdots \hat{\mathcal{O}}_p(t_p) \right] = \{ \hat{\mathcal{O}}_1(t_1) \hat{\mathcal{O}}_2(t_2) \cdots \hat{\mathcal{O}}_p(t_p) \} \text{ を時間順に並べたもの}$$

例：

$$\begin{aligned} T \left[ \hat{\mathcal{O}}_1(t_1) \hat{\mathcal{O}}_2(t_2) \right] &= \theta(t_1 - t_2) \hat{\mathcal{O}}_1(t_1) \hat{\mathcal{O}}_2(t_2) + \theta(t_2 - t_1) \hat{\mathcal{O}}_2(t_2) \hat{\mathcal{O}}_1(t_1) \\ T \left[ \hat{\mathcal{O}}_1(t_1) \hat{\mathcal{O}}_2(t_2) \hat{\mathcal{O}}_3(t_3) \right] &= \theta(t_1 - t_2) \theta(t_2 - t_3) \hat{\mathcal{O}}_1(t_1) \hat{\mathcal{O}}_2(t_2) \hat{\mathcal{O}}_3(t_3) + \cdots \\ &\quad + \theta(t_3 - t_2) \theta(t_2 - t_1) \hat{\mathcal{O}}_3(t_3) \hat{\mathcal{O}}_2(t_2) \hat{\mathcal{O}}_1(t_1) \end{aligned}$$

Time ordering を使うと、Eq. (3.9) は：

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle_I &= T \sum_{p=0}^{\infty} \frac{1}{p!} \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \cdots \int_0^{t_{p-1}} dt_p \left[ \frac{1}{i\hbar} \hat{H}_I^{(1)}(t_1) \right] \left[ \frac{1}{i\hbar} \hat{H}_I^{(1)}(t_2) \right] \cdots \left[ \frac{1}{i\hbar} \hat{H}_I^{(1)}(t_p) \right] |\psi(0)\rangle_I \\ &= T \sum_{p=0}^{\infty} \frac{1}{p!} \left[ \frac{1}{i\hbar} \int_0^t dt' \hat{H}_I^{(1)}(t') \right]^p |\psi(0)\rangle_I \\ &= T \exp \left[ \frac{1}{i\hbar} \int_0^t dt' \hat{H}_I^{(1)}(t') \right] |\psi(0)\rangle_I \end{aligned}$$

状態を  $\hat{H}^{(0)}$  の固有状態（完全系をなす）で展開：

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle_I &= \sum_k c_k(t) |\phi_k\rangle \quad \text{with} \quad \hat{H}^{(0)} |\phi_k\rangle = E_k^{(0)} |\phi_k\rangle \\ \Leftrightarrow |\psi(t)\rangle_S &= e^{-i\hat{H}^{(0)}t/\hbar} \sum_k c_k(t) |\phi_k\rangle = \sum_k c_k(t) e^{-iE_k^{(0)}t/\hbar} |\phi_k\rangle \end{aligned}$$



展開係数の満たす方程式：

$$i\hbar \sum_k \dot{c}_k(t) |\phi_k\rangle = \hat{H}_I^{(1)}(t) |\psi(t)\rangle_I = e^{i\hat{H}^{(0)}t/\hbar} \hat{H}_S^{(1)}(t) e^{-i\hat{H}^{(0)}t/\hbar} \sum_k c_k(t) |\phi_k\rangle$$

両辺に  $\langle\phi_l|$  を作用し、 $\hat{H}^{(0)} |\phi_k\rangle = E_k^{(0)} |\phi_k\rangle$  を使うと：

$$i\hbar \dot{c}_l = \sum_k \exp \left[ i \frac{E_l^{(0)} - E_k^{(0)}}{\hbar} t \right] \langle\phi_l| \hat{H}_S^{(1)}(t) |\phi_k\rangle c_k \equiv \sum_k V_{lk}(t) c_k$$

$c_l(t)$ ：

$$c_l(t) = c_l(t_0) + \int_{t_0}^t dt_1 V_{lk}(t_1) c_k(t_1) + \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 V_{lk_1}(t_1) V_{k_1 k_2}(t_2) c_k(t_2) + \dots$$

初期状態として  $c_k(t_0) = \delta_{ki}$  とし、 $\hat{H}^{(1)}$  の 1 次まで取ると：

$$c_l(t) \simeq \delta_{li} + \int_{t_0}^t dt' \exp \left[ i \frac{E_l^{(0)} - E_i^{(0)}}{\hbar} t' \right] \langle\phi_l| \hat{H}_S^{(1)}(t') |\phi_i\rangle$$

## 断熱定理

以下の状況を考える：

- 摂動が極めてゆっくりと変化。
- $\hat{H}^{(1)}(t \rightarrow -\infty) = 0$ 、 $\hat{H}^{(1)}(t > t_1) = \hat{\hat{H}}^{(1)} \neq 0$

Notice:  $t \rightarrow \infty$  において：

- ハミルトニアン：

$$\hat{H} = \hat{H}^{(0)} + \hat{\hat{H}}^{(1)}$$

- ハミルトニアンの固有状態（摂動の 1 次）：

$$|\Phi_l\rangle = |\phi_l\rangle + \sum_{k \neq l} \frac{|\phi_k\rangle \langle\phi_k| \hat{\hat{H}}^{(1)} |\phi_l\rangle}{E_l^{(0)} - E_k^{(0)}}$$

初期条件： $c_l(t \rightarrow -\infty) = \delta_{ln}$

$$c_n(t > t_1) \simeq 1 - i \frac{1}{\hbar} \int_{-\infty}^t dt' V_{nn}(t')$$

$$c_{k \neq n}(t > t_1) \simeq -i \frac{1}{\hbar} \int_{-\infty}^t dt' V_{kn}(t')$$

⇓ 部分積分

$$= \frac{1}{(E_n^{(0)} - E_k^{(0)})} \left[ \exp \left( -i \frac{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}{\hbar} t' \right) \langle \phi_k | \hat{H}_S^{(1)}(t') | \phi_n \rangle \right]_{t'=-\infty}^{t'=t}$$

$$- \frac{1}{(E_n^{(0)} - E_k^{(0)})} \int_{-\infty}^t dt' \exp \left( -i \frac{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}{\hbar} t' \right) \frac{d}{dt'} \langle \phi_k | \hat{H}_S^{(1)}(t') | \phi_n \rangle$$

⇓ 摂動の時間変化が十分遅いとき、第2項は無視できる

$$= \frac{1}{(E_n^{(0)} - E_k^{(0)})} \exp \left( -i \frac{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}{\hbar} t \right) \langle \phi_k | \hat{H}_S^{(1)}(t) | \phi_n \rangle \quad (3.10)$$

したがって、時刻  $t$  における状態は（相互作用表示では）

$$|\psi(t)\rangle_I \simeq \left( 1 - i \frac{1}{\hbar} \int_{-\infty}^t dt' V_{nn}(t') \right) |\phi_n\rangle + \sum_{k \neq n} \exp \left( -i \frac{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}{\hbar} t \right) \frac{|\phi_k\rangle \langle \phi_k | \hat{H}_S^{(1)}(t) | \phi_n \rangle}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}$$

⇓ 摂動の2次以上の項を無視

$$\simeq e^{i\alpha} \left[ |\phi_n\rangle + \sum_{k \neq n} \exp \left( -i \frac{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}{\hbar} t \right) \frac{|\phi_k\rangle \langle \phi_k | \hat{H}^{(1)}(t) | \phi_n \rangle}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} \right] + \dots$$

$$e^{i\alpha} = \exp \left( 1 - i \frac{1}{\hbar} \int_{-\infty}^t dt' V_{nn}(t') \right)$$

$t \rightarrow \infty$  における  $\hat{H} = \hat{H}^{(0)} + \hat{H}^{(1)}$  の固有状態（相互作用表示）：

$$\begin{aligned}
|\Phi_l(t)\rangle_I &\simeq e^{i\hat{H}^{(0)}t/\hbar} |\Phi_l\rangle_S \\
&\simeq e^{i\hat{H}^{(0)}t/\hbar} \left[ |\phi_l\rangle + \sum_{k \neq n} \frac{|\phi_k\rangle \langle \phi_k | \hat{H}^{(1)}(t) | \phi_l \rangle}{E_l^{(0)} - E_k^{(0)}} \right] \\
&\simeq e^{iE_l^{(0)}t/\hbar} |\phi_l\rangle + \sum_{k \neq n} e^{iE_k^{(0)}t/\hbar} \frac{|\phi_k\rangle \langle \phi_k | \hat{H}^{(1)}(t) | \phi_l \rangle}{E_l^{(0)} - E_k^{(0)}} \\
&= e^{iE_l^{(0)}t/\hbar} \left[ |\phi_l\rangle + \sum_{k \neq n} \exp\left(-i \frac{E_l^{(0)} - E_k^{(0)}}{\hbar} t\right) \frac{|\phi_k\rangle \langle \phi_k | \hat{H}^{(1)}(t) | \phi_l \rangle}{E_l^{(0)} - E_k^{(0)}} \right]
\end{aligned}$$

ただし上の式は、縮退がない場合を想定。以上から：

- $|\psi_l(t)\rangle_n$  と  $|\Phi_l(t)\rangle_n$  の差は位相因子。
- 縮退がなく、ポテンシャルがゆっくりと変化する場合、 $t \rightarrow -\infty$  であるエネルギー固有状態にあった状態は、 $t \rightarrow \infty$  でのエネルギー固有状態に移行する（断熱定理）。
- 特に、基底状態は基底状態であり続ける。

コメント：(3.10) 式が成り立つ条件（「摂動の時間変化が十分遅いときとは？」）

$\Rightarrow$  (3.10) 式で  $t \rightarrow \infty$  として、以下の量を比較

$$\begin{aligned}
e^{-i\omega_{nk}t} \langle \phi_k | \hat{H}_S^{(1)}(\infty) | \phi_n \rangle \quad \text{vs.} \quad I \equiv \int_{-\infty}^{\infty} dt' e^{-i\omega_{nk}t'} \frac{d}{dt'} \langle \phi_k | \hat{H}_S^{(1)}(t') | \phi_n \rangle \\
\omega_{nk} \equiv \frac{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}{\hbar}
\end{aligned}$$

簡単のため、 $0 \lesssim t \lesssim T$  のあいだに  $\hat{H}_S^{(1)}$  は 0 から  $\hat{H}_S^{(1)}(\infty)$  に変化するとする。

$$\hat{H}_S^{(1)}(t) \sim \frac{t}{T} \hat{H}_S^{(1)}(\infty).$$

すると：

$$I \sim \int_0^T dt' e^{-i\omega_{nk}t'} \left[ \frac{1}{T} \hat{H}_S^{(1)}(\infty) \right] \sim \frac{i}{\omega_{nk}T} (e^{-i\omega_{nk}T} - 1) \langle \phi_k | \hat{H}_S^{(1)}(\infty) | \phi_n \rangle$$

従って「摂動の時間変化が十分遅い」と言える条件：

$$\omega_{nk}T \ll 1$$

## 4 WKB 近似

### 4.1 Formulation

1次元量子力学を考える（ポテンシャルは時間に依らない）：

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] \varphi(x) = E\varphi(x) \quad \Rightarrow \quad \frac{d^2}{dx^2} \varphi + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V) \varphi = 0.$$

定常状態の波動関数を以下の形に書いてみる：

$$\varphi(x) = e^{iS(x)/\hbar}.$$

すると解くべき方程式は

$$(S')^2 - i\hbar S'' - 2m(E - V) = 0. \quad (4.1)$$

関数  $S$  を  $\hbar$  のべきで展開：

$$S = S_0 + (-i\hbar)S_1 + (-i\hbar)^2 S_2 + \dots$$

$\hbar$  の各次数で方程式を書き下すと：

$$\begin{aligned} (S'_0)^2 - 2m(E - V) &= 0 \\ 2S'_0 S'_1 + S''_0 &= 0 \\ \dots \end{aligned}$$

まず  $S_0$ ：

$$p(x) \equiv \sqrt{2m[E - V(x)]}$$

すると

$$\begin{aligned} S'_0 = \pm p &\Rightarrow S_0 = \pm \int^x dx' p(x') \\ S'_1 = -\frac{p'}{p} &\Rightarrow S_1 = -\frac{1}{2} \ln p \end{aligned}$$

従って

$$\varphi(x) = e^{iS(x)/\hbar} = \frac{c_1}{\sqrt{p}} \exp \left[ \frac{i}{\hbar} \int^x dx' p(x') \right] + \frac{c_2}{\sqrt{p}} \exp \left[ -\frac{i}{\hbar} \int^x dx' p(x') \right]$$

$c_1$  と  $c_2$  は定数

$E < V$  の領域（ $p$  が純虚数になる領域）では以下の式の方が見やすい

$$\rho(x) \equiv \sqrt{2m(V - E)} \quad \Rightarrow \quad \varphi(x) = \frac{d_1}{\sqrt{\rho}} \exp \left[ -\frac{1}{\hbar} \int^x dx' \rho(x') \right] + \frac{d_2}{\sqrt{\rho}} \exp \left[ \frac{1}{\hbar} \int^x dx' \rho(x') \right]$$

$d_1$  と  $d_2$  は定数

## WKB 近似が成り立つ条件

$S$  の定数項は波動関数全体の位相なので非物理的であることに注意すると (Eq.(4.1) は  $S$  の微分しか含まないので、微分に大小関係をつけて)、必要な条件は

$$|S'_0| \gg |(-i\hbar)S'_1| \Rightarrow |p| \gg \hbar \frac{|p'|}{|p|} \Rightarrow \hbar \left| \frac{p'}{p^2} \right| \ll 1 \quad (4.2)$$

あるいは  $p^2 = 2m(E - V)$  より  $pp' = mV'$  を使うと

$$\hbar \left| \frac{mV'}{p^3} \right| \ll 1$$

$V = E$  となる点の近傍 (そこでは  $p \rightarrow 0$ ) では、上の条件は成り立たない!

$V = E$  近傍でポテンシャルを線形近似し、WKB 近似が使えない領域を見積もる:

$$V(x) \simeq E + V'(x - x_0) + \dots$$

$x_0$ :  $V = E$  となる点 (古典的には転回点)

$V'$ :  $x = x_0$  での微分値

$$\Rightarrow p = \sqrt{-2mV'(x - x_0)}, \quad p' = \sqrt{\frac{-mV'}{2(x - x_0)}}$$

従って満たすべき条件は:

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

古典的運動との対比で考えると ( $E > V$  なら)  $p$  は運動量

$$\Rightarrow \text{ドブロイ波長: } \lambda = \frac{2\pi\hbar}{p}$$

波動関数の位相が  $2\pi$  変わるのに必要な距離

従って上の条件 (4.2) は、以下のようにも書ける:

$$\frac{1}{2\pi} \left| \frac{d\lambda}{dx} \right| \ll 1 \Rightarrow \frac{\lambda}{2\pi} \left| \frac{d\lambda}{dx} \right| \ll \lambda$$

すなわち、長さ  $\lambda/2\pi$  あたりの  $\lambda$  の変化は  $\lambda$  より十分小さい必要がある。

## 4.2 転回点 ( $V = E$ ) 近傍での接続公式

WKB 近似に基づく波動関数：

$$\varphi(x) = \begin{cases} \frac{c_1}{\sqrt{p}} \exp \left[ \frac{i}{\hbar} \int^x dx' p(x') \right] + \frac{c_2}{\sqrt{p}} \exp \left[ -\frac{i}{\hbar} \int^x dx' p(x') \right] & : E > V \\ \frac{d_1}{\sqrt{\rho}} \exp \left[ -\frac{1}{\hbar} \int^x dx' \rho(x') \right] + \frac{d_2}{\sqrt{\rho}} \exp \left[ \frac{1}{\hbar} \int^x dx' \rho(x') \right] & : E < V \end{cases}$$

$$p(x) \equiv \sqrt{2m(E - V)} \quad \rho(x) \equiv \sqrt{2m(V - E)}$$

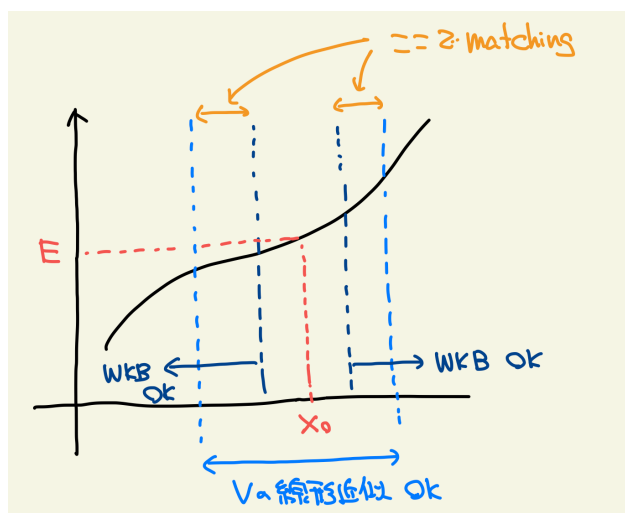
$(c_1, c_2)$  と  $(d_1, d_2)$  との関係は？

$V = E$  近傍：WKB 近似は使えない

⇒ ポテンシャルを線形で近似

$$V = F(x - x_0) + E \quad (F > 0)$$

- $x < x_0$  :  $E > V$  (古典的に粒子が存在し得る)
- $x > x_0$  :  $E < V$  (古典的には粒子は存在し得ない)



Schrödinger 方程式

$$\begin{aligned}
 -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \varphi + [F(x - x_0) + E] \varphi &= E\varphi \\
 \Downarrow \quad z \equiv \left( \frac{2mF}{\hbar^2} \right)^{1/3} (x - x_0) \\
 \frac{d^2}{dz^2} \varphi - z\varphi &= 0
 \end{aligned} \tag{4.3}$$

Notice

$$\begin{aligned}
 \frac{1}{\hbar} \int_x^{x_0} dx' p(x') &\simeq \frac{1}{\hbar} \int_x^{x_0} dx' \sqrt{-2mF(x' - x_0)} = \frac{2}{3} |z|^{3/2} \quad : \quad z < 0 \\
 \frac{1}{\hbar} \int_{x_0}^x dx' \rho(x') &\simeq \frac{1}{\hbar} \int_{x_0}^x dx' \sqrt{2mF(x' - x_0)} = \frac{2}{3} z^{3/2} \quad : \quad z > 0
 \end{aligned}$$

Eq. (4.3) の解は Airy 関数と呼ばれ、ふたつの独立な解が存在：

$$\begin{aligned}
 \text{Ai}(z) &\sim \begin{cases} \frac{1}{2\sqrt{\pi} z^{1/4}} e^{-\frac{2}{3} z^{3/2}} & : z \rightarrow \infty \\ \frac{1}{\sqrt{\pi} |z|^{1/4}} \cos \left( \frac{2}{3} |z|^{3/2} - \frac{1}{4} \pi \right) & : z \rightarrow -\infty \end{cases} \\
 \text{Bi}(z) &\sim \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{\pi} z^{1/4}} e^{\frac{2}{3} z^{3/2}} & : z \rightarrow \infty \\ \frac{-1}{\sqrt{\pi} |z|^{1/4}} \sin \left( \frac{2}{3} |z|^{3/2} - \frac{1}{4} \pi \right) & : z \rightarrow -\infty \end{cases}
 \end{aligned}$$

WKB 近似の接続公式：

- Case 1：波動関数が Ai に比例する場合（Bi を含まない）
  - $x < x_0$  の領域：定常波
  - $x > x_0$  の領域：転回点から離れるほど波動関数は減少

$$\varphi(x) \simeq \begin{cases} \frac{C}{\sqrt{p}} \cos \left[ \frac{1}{\hbar} \int_x^{x_0} dx' p(x') - \frac{1}{4} \pi \right] & : \quad x < x_0 \\ \frac{C}{2\sqrt{\rho}} \exp \left[ -\frac{1}{\hbar} \int_{x_0}^x dx' \rho(x') \right] & : \quad x > x_0 \end{cases}$$

- Case 2：波動関数が  $\text{Ai} - i\text{Bi}$  に比例する場合

- $x < x_0$  の領域：転回点から離れる方向に進む進行波
- $x > x_0$  の領域：転回点から離れるほど波動関数は増加

$$\varphi(x) \simeq \begin{cases} \frac{C}{\sqrt{p}} \exp \left[ i \left( \frac{i}{\hbar} \int_x^{x_0} dx' p(x') - \frac{1}{4} \pi \right) \right] & : x < x_0 \\ \frac{-iC}{\sqrt{\rho}} \exp \left[ \frac{1}{\hbar} \int_{x_0}^x dx' \rho(x') \right] & : x > x_0 \end{cases}$$

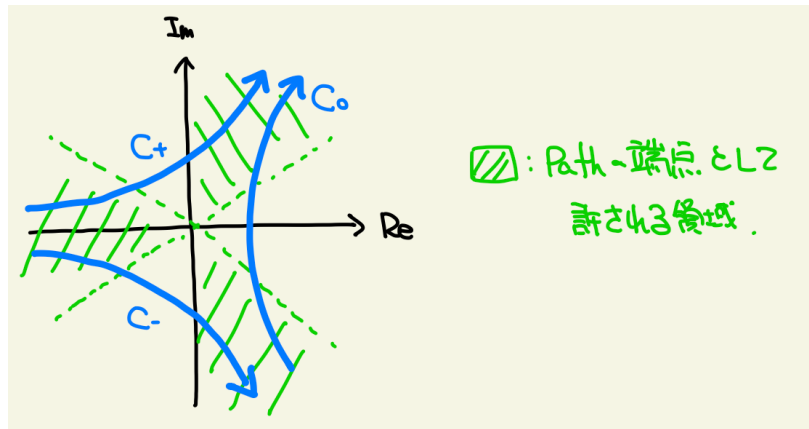
### 鞍点法を用いた接続公式の導出

Airy 関数の積分表示：

$$\Phi(z) \equiv \frac{1}{2\sqrt{\pi}i} \int_C dt \exp \left( -zt + \frac{1}{3}t^3 \right)$$

経路  $C$  は、 $|t| \rightarrow \infty$  で  $\text{Re} t^3 \rightarrow +\infty$  となるようにとる

経路  $C$  の選び方により、独立なふたつの解が存在



$\Phi$  が Eq. (4.3) を満たすことを見る：

$$\begin{aligned} \left( \frac{d^2}{dz^2} - z \right) \Phi(z) &= \frac{1}{2\sqrt{\pi}i} \int_C dt (t^2 - z) \exp \left( -zt + \frac{1}{3}t^3 \right) \\ &= \frac{1}{2\sqrt{\pi}i} \int_C dt \frac{d}{dt} \exp \left( -zt + \frac{1}{3}t^3 \right) \end{aligned}$$

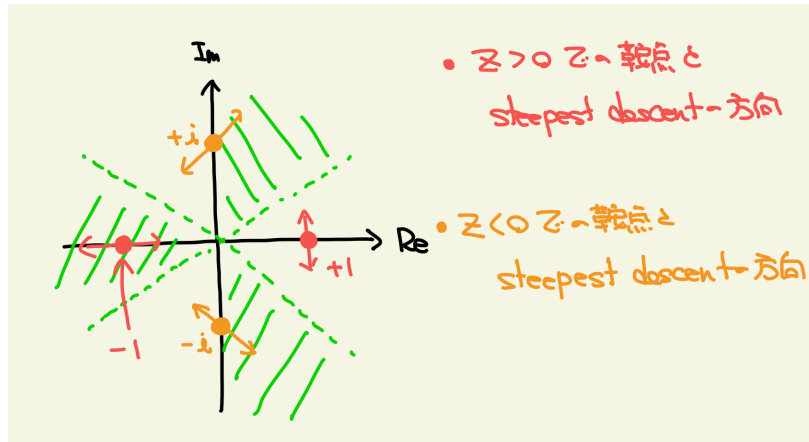
$C$  の遠方で表面項が消えるので、 $\Phi$  は Eq. (4.3) を満たす。

$\Phi$  の  $|z| \rightarrow \infty$  での漸近形を鞍点法で見積もってみる：



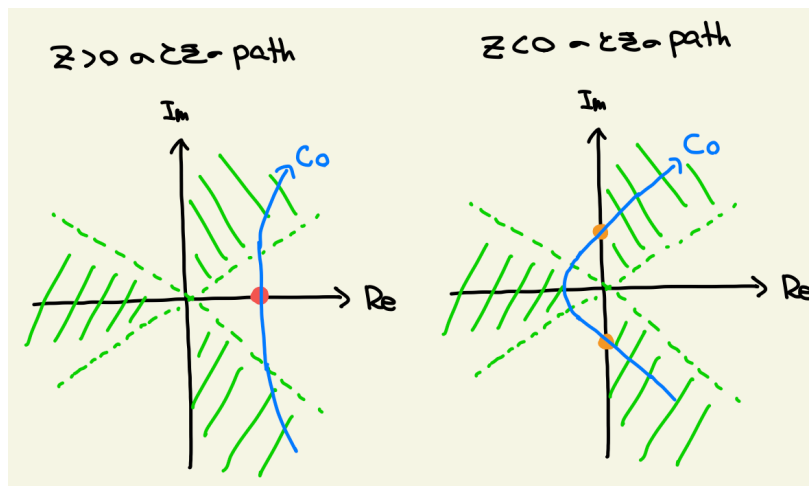
⇒  $z$  の符号によって鞍点は異なる。

⇒ 以下で与えられる rescale した積分変数について、鞍点は以下の図の通り：



まず、経路  $C_0$  に対応した  $\Phi$  の漸近的ふるまいを鞍点法で見積もる：

⇒  $z > 0$  および  $z < 0$  で考慮すべき鞍点は、以下の図のとおり：



- $z > 0$  のとき ( $z \rightarrow \infty$  で指数関数的ふるまいを期待)：

$$t = z^{1/2}s$$

と、 $t$  から  $s$  に変数変換。すると：

$$\Phi(z) = \frac{z^{1/2}}{2\sqrt{\pi}i} \int_{C_0} ds \exp \left[ z^{3/2} \left( -s + \frac{1}{3}s^3 \right) \right]$$

ここで：

- 被積分関数の鞍点は  $s = 1$  (Steepest descent の方向は虚軸に平行)  
 $\Rightarrow$  鞍点近傍で  $s = 1 + i\xi$
- $s = -1$  も鞍点だが steepest descent は実軸に平行なので、効かない

$$\begin{aligned}
\Phi(z) &= \frac{z^{1/2}}{2\sqrt{\pi}} \int d\xi \exp \left[ z^{3/2} \left( -\frac{2}{3} - \xi^2 + O(\xi^3) \right) \right] \\
&\quad \Downarrow \quad \eta = z^{3/4}\xi \\
&= \frac{z^{-1/4}}{2\sqrt{\pi}} \exp \left[ -\frac{2}{3}z^{3/2} \right] \int d\xi \exp \left[ -\eta^2 + O(\eta^3/z^{1/3}) \right] \\
&\quad \Downarrow \quad \int d\eta e^{-\eta^2} = \sqrt{\pi} \\
&= \frac{z^{-1/4}}{2} \exp \left[ -\frac{2}{3}z^{3/2} \right]
\end{aligned}$$

- $z < 0$ : 振動的ふるまいを期待

$$t = |z|^{1/2}u$$

として

$$\begin{aligned}
\Phi(z) &= \frac{|z|^{1/2}}{2\sqrt{\pi}i} \int_{C_0} du \exp \left[ |z|^{3/2} \left( u + \frac{1}{3}u^3 \right) \right] \\
&\quad \Downarrow \quad \text{非積分関数の鞍点は } u = \pm i \\
&\quad \Downarrow \quad u = \pm i + re^{i\theta} \Rightarrow u + \frac{1}{3}u^3 = \pm \frac{2}{3}i \pm ir^2e^{2i\theta} \\
&\quad \Downarrow \quad \text{Steepest descent の方向 : } \theta = \pm \frac{1}{4}\pi \\
&\quad \Downarrow \quad \text{鞍点近傍で } u = 1 + \sqrt{\pm i}\xi \\
&= \frac{|z|^{1/2}}{2\sqrt{\pi}i} \left[ \sqrt{i} \int d\xi \exp \left\{ |z|^{3/2} \left( \frac{2}{3}i - \xi^2 + O(\xi^3) \right) \right\} + (u \simeq -i \text{ 近傍の寄与}) \right] \\
&= \frac{|z|^{-1/4}}{2i} \left[ e^{i\pi/4} \exp \left( \frac{2}{3}i|z|^{3/2} \right) - e^{-i\pi/4} \exp \left( -\frac{2}{3}i|z|^{3/2} \right) \right] \\
&= |z|^{-1/4} \sin \left( \frac{2}{3}|z|^{3/2} + \frac{1}{4}\pi \right) \\
&= |z|^{-1/4} \cos \left( \frac{2}{3}|z|^{3/2} - \frac{1}{4}\pi \right) \tag{4.4}
\end{aligned}$$

$C_0$  から得られる波動関数：

- $x > x_0$  で ( $A$  を定数として)：

$$\begin{aligned}\varphi(x) &\simeq A \times \frac{1}{2}(x - x_0)^{-1/4} \exp \left[ \sqrt{\frac{2mF}{\hbar^2}}(x - x_0)^{3/2} \right] \\ &\simeq (2mF)^{1/4} A \times \frac{1}{2\sqrt{\rho}} \exp \left[ -\frac{1}{\hbar} \int_{x_0}^x dx' \rho(x') \right] \\ \rho &= \sqrt{2mF(x - x_0)} \quad \Rightarrow \quad \int_{x_0}^x dx' \rho(x') = \sqrt{2mF} \times \frac{2}{3}(x - x_0)^{3/2}\end{aligned}$$

$x \rightarrow \infty$  でゼロに漸近する

- $x < x_0$  で：

$$\begin{aligned}\varphi(x) &\simeq A \times |x - x_0|^{-1/4} \cos \left[ \sqrt{\frac{2mF}{\hbar^2}}|x - x_0|^{3/2} - \frac{1}{4}\pi \right] \\ &\simeq (2mF)^{1/4} A \times \frac{1}{\sqrt{p}} \cos \left[ \frac{1}{\hbar} \int_x^{x_0} dx' p(x') - \frac{1}{4}\pi \right]\end{aligned}$$

右向きと左向きの波の重ね合わせ

続いて、 $C_{\pm}$  に対応した  $\Phi$  の漸近的ふるまい：

- $z > 0$

$$t = z^{1/2}s$$

として

$$\Phi(z) = \frac{z^{1/2}}{2\sqrt{\pi}i} \int_{C_{\pm}} ds \exp \left[ z^{3/2} \left( -s + \frac{1}{3}s^3 \right) \right]$$

やはり鞍点法を用いる。

- 考慮すべき鞍点は  $s = -1$  (Steepest descent の方向は実軸)  
 $\Rightarrow$  鞍点近傍で  $s = -1 + \xi$

$$\begin{aligned}
\Phi(z) &= \frac{z^{1/2}}{2\sqrt{\pi}i} \int d\xi \exp \left[ z^{3/2} \left( \frac{2}{3} - \xi^2 + O(\xi^3) \right) \right] \\
&\quad \Downarrow \quad \eta = z^{3/4}\xi \\
&= \frac{z^{-1/4}}{2\sqrt{\pi}i} \exp \left[ \frac{2}{3} z^{3/2} \right] \int d\xi \exp \left[ -\eta^2 + O(\eta^3/z^{1/3}) \right] \\
&\quad \Downarrow \quad \int d\eta e^{-\eta^2} = \sqrt{\pi} \\
&= -i \frac{z^{-1/4}}{2} \exp \left[ \frac{2}{3} z^{3/2} \right]
\end{aligned}$$

- $z < 0$  :

$C_0$  の経路の  $s = \pm i$  のどちらかの鞍点のみが寄与

$\Rightarrow C_0$  の場合の結果を使える ((4.4) の最後から 3 行目を見よ)

$\Rightarrow s = -i$  では  $C_0$  の場合と比べて鞍点を逆向きに通るので、マイナス符号がつく

$$\Phi(z) \simeq \frac{|z|^{-1/4}}{2i} e^{\pm i\pi/4} \exp \left[ \pm i \frac{2}{3} |z|^{3/2} \right] = \pm \frac{|z|^{-1/4}}{2} \exp \left[ \pm i \left( \frac{2}{3} |z|^{3/2} - \frac{1}{4}\pi \right) \right]$$

$C_{\pm}$  から得られる波動関数 :

- $x > x_0$  で :

$$\begin{aligned}
\varphi(x) &\simeq A \times \frac{-i}{2} (x - x_0)^{-1/4} \exp \left[ \sqrt{\frac{2mF}{\hbar^2}} (x - x_0)^{3/2} \right] \\
&\simeq -i (2mF)^{1/4} A \times \frac{1}{2\sqrt{\rho}} \exp \left[ \frac{1}{\hbar} \int_{x_0}^x dx' \rho(x') \right]
\end{aligned}$$

$x \rightarrow \infty$  で発散

- $x < x_0$  で :

$$\begin{aligned}
\varphi(x) &\simeq A \times \frac{|x - x_0|^{-1/4}}{2} \exp \left[ \pm i \left( \sqrt{\frac{2mF}{\hbar^2}} |x - x_0|^{3/2} - \frac{1}{4}\pi \right) \right] \\
&\simeq \pm (2mF)^{1/4} A \times \frac{1}{2\sqrt{p}} \exp \left[ \pm i \left( \frac{1}{\hbar} \int_x^{x_0} dx' p(x') - \frac{1}{4}\pi \right) \right]
\end{aligned}$$

進行波

### 4.3 WKB 近似と古典論の対応

3次元の量子力学：

$$i\hbar\dot{\psi}(\vec{x},t) = \hat{H}\psi(\vec{x},t)$$

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V$$

WKB 近似を適用してみる：

$$\psi(\vec{x},t) = A \exp\left[\frac{i}{\hbar}\sigma(\vec{x},t)\right]$$

$$\sigma = -Et + S(\vec{x}) \quad \Rightarrow \quad \dot{\sigma} = -E$$

$O(\hbar^{-1})$  だけ残すと：

$$-\dot{\sigma} = \frac{1}{2m}(\nabla\sigma)^2 + V(\vec{x})$$

あるいは

$$E = \frac{1}{2m}(\nabla S)^2 + V(\vec{x})$$

これは解析力学で出てきた Hamilton-Jacobi (HJ) 方程式。

$\Rightarrow$  WKB 近似の  $O(\hbar^{-1})$  で、 $S$  は HJ 方程式を満たす。

古典論の復習：HJ 方程式の解  $S(\vec{x})$  が与えられたとする：

$\Rightarrow$  古典的に運動する解の組が与えられる：

$$\vec{p}(\vec{x}) = \vec{\nabla}S(\vec{x})$$

$\Rightarrow S$  の一定面は、粒子の進行方向と直行。

$$S(\vec{x}) = \int^{\vec{x}} d\vec{x}' \vec{p}(\vec{x}').$$

WKB 近似を用いた波動関数を使うと：

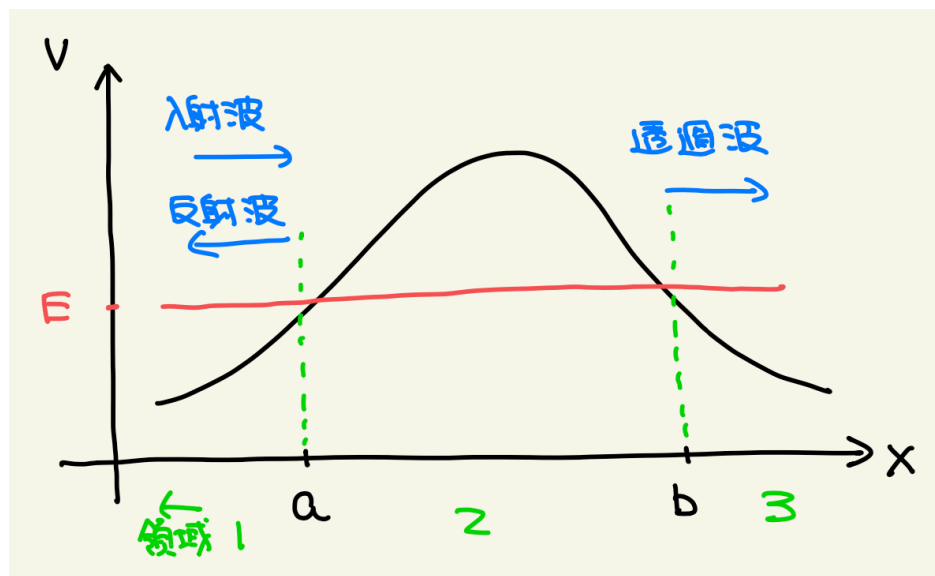
$\Rightarrow$  確率の流れベクトル：

$$\vec{J} = -i\frac{\hbar}{2m} \left[ \psi^*(\vec{\nabla}\psi) - (\vec{\nabla}\psi^*)\psi \right] \propto \nabla S = \vec{p}$$

$\Rightarrow$  古典的な粒子の運動の運動量に比例。

## 4.4 WKB 近似を用いたトンネル効果の解析

以下の図のようなポテンシャルを考える。



領域 1 :  $x < a$

$$\varphi(x) \simeq \frac{1}{\sqrt{p}} \cos \left[ \frac{1}{\hbar} \int_a^x dx' p(x') - \frac{1}{4} \pi \right]$$

領域 2 :  $a < x < b$  (ここは、古典的には粒子が存在し得ない)

$$\varphi(x) \simeq \frac{1}{2\sqrt{\rho}} \exp \left[ -\frac{1}{\hbar} \int_a^x dx' \rho(x') \right] = \frac{1}{2\sqrt{\rho}} \exp \left[ -\frac{1}{\hbar} \int_a^b dx' \rho(x') \right] \exp \left[ -\frac{1}{\hbar} \int_b^x dx' \rho(x') \right]$$

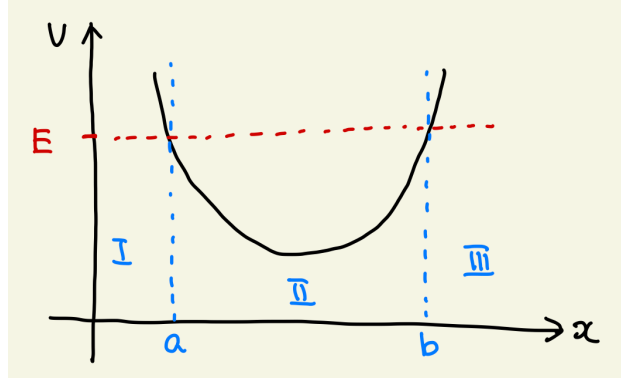
領域 3 :  $x > b$

$$\varphi(x) \simeq \frac{i}{2\sqrt{p}} \exp \left[ -\frac{1}{\hbar} \int_a^b dx' \rho(x') \right] \exp \left[ i \left( \frac{1}{\hbar} \int_b^x dx' p(x') - \frac{1}{4} \pi \right) \right]$$

従って、透過率：

$$T = \frac{(\text{透過フラックス})}{(\text{入射フラックス})} \simeq \exp \left[ -\frac{2}{\hbar} \int_a^b dx' \rho(x') \right] = \exp \left[ -\frac{2}{\hbar} \int_a^b dx' \sqrt{2m[V(x') - E]} \right]$$

## 4.5 Bohr-Sommerfeld の量子条件



1次元ポテンシャルに束縛された粒子のエネルギーを WKB 近似を用いて解析する。

- エネルギー：  $E$
- 古典的転回点：  $x = a, b \Rightarrow V(a) = V(b) = E$

領域を 3 つに分類：

- $x > a$ ：領域 I
- $a < x < b$ ：領域 II（ここだけ、古典的に許される）
- $x < b$ ：領域 III

領域 I（古典的に禁止）： $x \rightarrow -\infty$  で指数関数的に減衰

$$\varphi_{\text{I}}(x) \simeq \frac{A}{\sqrt{\rho(x)}} \exp \left[ -\frac{1}{\hbar} \int_x^a dx' \rho(x') \right]$$

領域 III（古典的に禁止）： $x \rightarrow +\infty$  で指数関数的に減衰

$$\varphi_{\text{III}}(x) \simeq \frac{C}{\sqrt{\rho(x)}} \exp \left[ -\frac{1}{\hbar} \int_b^x dx' \rho(x') \right]$$

領域 II：振動解

- 領域 I から接続すると：

$$\varphi_{\text{II}}(x) \simeq \frac{2A}{\sqrt{p(x)}} \cos \left[ \frac{1}{\hbar} \int_a^x dx' p(x') - \frac{\pi}{4} \right]$$

- 領域 III から接続すると：

$$\varphi_{\text{II}}(x) \simeq \frac{2C}{\sqrt{p(x)}} \cos \left[ \frac{1}{\hbar} \int_x^b dx' p(x') - \frac{\pi}{4} \right]$$

二つの波動関数が同一であるための条件：

$$\begin{aligned} \varphi_{\text{II}}^{(\text{from III})}(x) &\simeq \frac{2C}{\sqrt{p(x)}} \cos \left[ \frac{1}{\hbar} \int_x^b dx' p(x') - \frac{\pi}{4} \right] \\ &= \frac{2C}{\sqrt{p(x)}} \cos \left[ \frac{1}{\hbar} \int_a^x dx' p(x') - \frac{\pi}{4} - \left( \frac{1}{\hbar} \int_a^b dx' p(x') - \frac{\pi}{2} \right) \right] \\ &= \varphi_{\text{II}}^{(\text{from I})}(x) \simeq \frac{2A}{\sqrt{p(x)}} \cos \left[ \frac{1}{\hbar} \int_a^x dx' p(x') - \frac{\pi}{4} \right] \end{aligned}$$

従って：

$$A = (-1)^n C$$

および

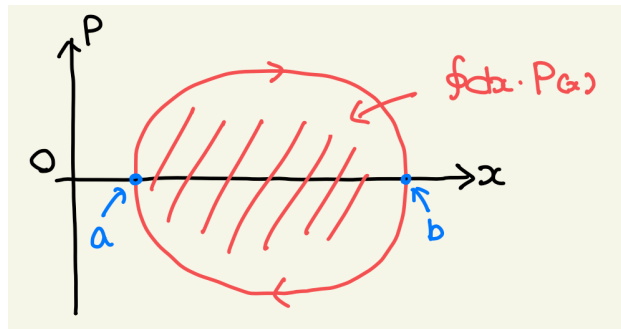
$$\frac{1}{\hbar} \int_a^b dx' p(x') - \frac{\pi}{2} = n\pi$$

第 2 式を書き換えると：

$$\oint dx' p(x') \equiv 2 \int_a^b dx' p(x') = 2\pi \left( n + \frac{1}{2} \right) \hbar \quad : \quad \text{Bohr-Sommerfeld の量子化条件}$$

Notice: 上の式の左辺は、周期振動について、1 周期分の運動の位相空間体積

⇒ 束縛状態について、位相空間体積は量子化される





## 調和振動子の例

ハミルトニアン：

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

転回点：

$$\frac{1}{2}m\omega^2 x^2 = E \quad \Rightarrow \quad x_{\pm} \equiv \pm \sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}} \equiv \pm a$$

「運動量」関数：

$$p(x) = \sqrt{2m(E - V)} = \sqrt{2mE - m^2\omega^2 x^2}$$

位相空間体積：

$$\begin{aligned} \oint dx p(x) &= 2 \int_{-a}^a dx \sqrt{2mE - m^2\omega^2 x^2} = 2m\omega \int_{-a}^a dx \sqrt{a^2 - x^2} \\ &\quad \Downarrow \quad \int_{-a}^a dx \sqrt{a^2 - x^2} = \frac{1}{2}\pi a^2 \\ &= \pi m\omega a^2 = \frac{2\pi E}{\omega} \end{aligned}$$

量子化条件：

$$\frac{2\pi E}{\omega} = 2\pi \left( n + \frac{1}{2} \right) \hbar \quad \Rightarrow \quad E = \left( n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega.$$

## 5 経路積分

### 5.1 経路積分による量子力学の定式化

以下、1 自由度の量子力学を考える：

- 位置演算子： $\hat{x}$
- 運動量演算子： $\hat{p}$

交換関係

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$$

Hamiltonian:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \hat{p}^2 + V(\hat{x})$$

位置演算子（Heisenberg 描像の）の固有状態：

$$|x; t\rangle \text{ with } \hat{x}(t) |x; t\rangle = x |x; t\rangle$$

Schrodinger 描像との対応関係：

$$\hat{\mathcal{O}}(t) = e^{i\hat{H}t/\hbar} \hat{\mathcal{O}} e^{-i\hat{H}t/\hbar} \quad (\text{LHS/RHS: Heisenberg/Schrodinger 描像})$$

$$|x; t\rangle = e^{i\hat{H}t/\hbar} |x\rangle \quad \text{with } \hat{x} |x\rangle = x |x\rangle$$

以下、ある時刻  $t_i$  に  $x_i$  にいた粒子が別の時刻  $t_f$  に  $x_f$  に存在する確率振幅を考える：

$$\langle q_f; t_f | x_i; t_i \rangle = \langle x_f | e^{-i\hat{H}(t_f - t_i)/\hbar} | x_i \rangle$$

ちなみに、これまでは Schrodinger 方程式を解いて時間発展を解析：

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

このあとよく出てくる完全系の表式：

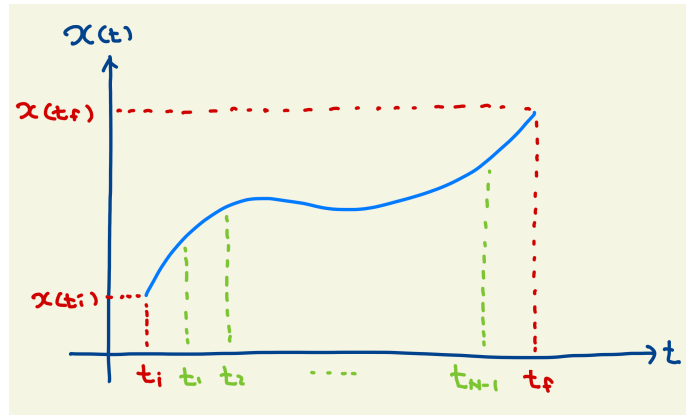
$$\begin{aligned} 1 &= \int dx_n |x_n; t_n\rangle \langle x_n; t| \quad \Leftrightarrow \quad \langle x|x'\rangle = \delta(x - x') \\ 1 &= \int dp_n |p_n; t_n\rangle \langle p_n; t| \quad \Leftrightarrow \quad \langle p|p'\rangle = \delta(p - p') \end{aligned}$$

特に、位置演算子の完全系の式を使うと：

$$\begin{aligned}
 \langle q_f; t_f | x_i; t_i \rangle &= \int dx_1 \langle q_f; t_f | x_1; t_1 \rangle \langle q_1; t_1 | x_i; t_i \rangle \\
 &= \dots \\
 &= \int dx_1 dx_2 \dots dx_{N-1} \langle q_f; t_f | x_{N-1}; t_{N-1} \rangle \dots \langle q_2; t_2 | x_1; t_1 \rangle \langle q_1; t_1 | x_i; t_i \rangle
 \end{aligned}$$

ただし：

$$t_n = t_i + n\Delta t \quad \text{with} \quad \Delta t \equiv \frac{t_f - t_i}{N}$$



そして、分割数  $N$  を無限大に持っていく：

$$\Rightarrow \Delta t = t_n - t_{n-1} \text{ は微小}$$

すると

$$\begin{aligned}
 \langle x_n; t_n | x_{n-1}; t_{n-1} \rangle &= \langle x_n | e^{-i\hat{H}(t_n - t_{n-1})/\hbar} | x_{n-1} \rangle \\
 &= \langle x_n | \left[ 1 - i\hbar^{-1}\hat{H}\Delta t + O(\Delta t^2) \right] | x_{n-1} \rangle \\
 &= \langle x_n | x_{n-1} \rangle - i\hbar^{-1}\Delta t \langle x_n | \hat{H} | x_{n-1} \rangle + \dots \\
 &= \delta(x_n - x_{n-1}) - i\hbar^{-1}\Delta t \langle x_n | \hat{H} | x_{n-1} \rangle + \dots \\
 &= \int \frac{dp_n}{2\pi\hbar} e^{ip_n(x_n - x_{n-1})/\hbar} - i\hbar^{-1}\Delta t \langle x_n | \hat{H} | x_{n-1} \rangle + \dots
 \end{aligned}$$

Here,  $p_n$  is just an integration variable

Hamiltonian についての行列要素：

$$\begin{aligned}
\langle x_n | \hat{H}(\hat{x}, \hat{p}) | x_{n-1} \rangle &= \int dp_n \langle x_n | p_n \rangle \langle p_n | \hat{H}(\hat{x}, \hat{p}) | x_{n-1} \rangle \\
&\Downarrow \quad \langle x | p \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx} \\
&= \int \frac{dp_n}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ip_n x_n / \hbar} \langle p_n | H(x_{n-1}, p_n) | x_{n-1} \rangle \\
&= \int \frac{dp_n}{2\pi\hbar} e^{ip_n(x_n - x_{n-1}) / \hbar} H(x_{n-1}, p_n)
\end{aligned}$$

従って、微小時間に対する遷移確率振幅は

$$\begin{aligned}
\langle x_n; t_n | x_{n-1}; t_{n-1} \rangle &= \int \frac{dp_n}{2\pi\hbar} e^{ip_n(x_n - x_{n-1}) / \hbar} \left[ 1 - i\hbar^{-1} \Delta t \langle x_n | \hat{H} | x_{n-1} \rangle \right] \\
&= \int \frac{dp_n}{2\pi\hbar} \exp \left[ i\hbar^{-1} \{ p_n(x_n - x_{n-1}) - \Delta t H(x_{n-1}, p_n) \} \right] \\
&\Downarrow \quad \dot{x}_{n-1} \equiv \frac{x_n - x_{n-1}}{\Delta t} \\
&= \int \frac{dp_n}{2\pi\hbar} \exp \left[ i\hbar^{-1} \Delta t \{ \dot{x}_{n-1} p_n - H(x_{n-1}, p_n) \} \right]
\end{aligned}$$

従って、遷移確率振幅は

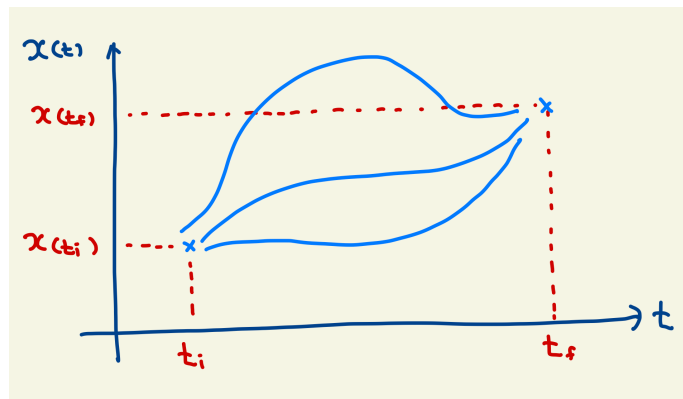
$$\begin{aligned}
\langle q_f; t_f | x_i; t_i \rangle &= \int dx_1 \cdots dx_{N-1} \frac{dp_1}{2\pi\hbar} \cdots \frac{dp_N}{2\pi\hbar} \exp \left[ i\hbar^{-1} \Delta t \sum_{n=1}^N \{ \dot{x}_{n-1} p_n - H(x_{n-1}, p_n) \} \right] \\
&= \int dx_1 \frac{dp_1}{2\pi\hbar} \cdots \exp \left[ i\hbar^{-1} \Delta t \sum_{n=1}^N \left\{ \dot{x}_{n-1} p_n - \frac{p_n^2}{2m} - V(x_{n-1}) \right\} \right] \\
&= \int dx_1 \frac{dp_1}{2\pi\hbar} \cdots \exp \left[ i\hbar^{-1} \Delta t \sum_{n=1}^N \left\{ -\frac{(p_n - m\dot{x}_{n-1})^2}{2m} + \frac{1}{2} m \dot{x}_{n-1}^2 - V(x_{n-1}) \right\} \right] \\
&\Downarrow \quad \int \frac{dp_n}{2\pi\hbar} \exp \left[ i\hbar^{-1} \Delta t \left\{ -\frac{(p_n - m\dot{x}_{n-1})^2}{2m} \right\} \right] = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar \Delta t}} \equiv A^{-1} \\
&= A^{-1} \int \frac{dx_1}{A} \frac{dx_2}{A} \cdots \frac{dx_{N-1}}{A} \exp \left[ i\hbar^{-1} \Delta t \sum_{n=1}^N \left\{ \frac{1}{2} m \dot{x}_{n-1}^2 - V(x_{n-1}) \right\} \right] \\
&\Downarrow \quad L(x, \dot{x}) = \frac{1}{2} m \dot{x}^2 - V(x) \\
&\equiv \int \mathcal{D}x \exp \left[ i\hbar^{-1} \int_{t_i}^{t_f} dt L(x(t), \dot{x}(t)) \right]
\end{aligned}$$

あるいは  $S = \int dt L$  を使うと：

$$\langle q_f; t_f | x_i; t_i \rangle = \int \mathcal{D}x e^{iS/\hbar}$$

上の式が、経路積分で遷移振幅を与える式：

- Schematic には、遷移振幅は全ての可能な経路についての和で与えられる。
- 経路の起点と終点は、考えている初期状態と終状態で決まる
  - $x(t_0) = x(t_i)$
  - $x(t_N) = x(t_f)$
- それぞれの経路の寄与は、 $e^{iS/\hbar}$



## 5.2 波動関数と Schrodinger 方程式

波動関数：

$$\psi(x, t) = \langle x | \psi(t) \rangle = \langle x; t | \psi \rangle$$

いま、初期状態を  $t = t_i$  で与える：

$$\psi(x, t = t_i) = \langle x; t = t_i | \psi \rangle$$

任意の時刻における波動関数：

$$\psi(x, t) = \langle x; t | \psi \rangle = \int dx' \langle x; t | x'; t_i \rangle \langle x'; t_i | \psi \rangle \equiv \int dx' U(x; t | x'; t_i) \psi(x'; t_i)$$

すると、 $U(x; t | x'; t') \equiv \langle x; t | x'; t' \rangle$  は経路積分で計算可能。

以下、 $\psi(x, t)$  の時間発展の従う方程式を導く：

$$\begin{aligned}
\psi(x, t + \delta t) &= \int \frac{dx'}{A} \exp \left[ i\hbar^{-1} \int_t^{t+\delta t} dt' L(t') \right] \psi(x'; t) \\
&\simeq \int \frac{dx'}{A} \exp \left[ i\hbar^{-1} \delta t \left\{ \frac{1}{2} m \left( \frac{x - x'}{\delta t} \right)^2 - V \right\} \right] \psi(x'; t) \\
&\quad \Downarrow \quad x' - x = \epsilon \\
&= \int \frac{d\epsilon}{A} \exp \left[ i\hbar^{-1} \left( \frac{1}{2} m \frac{\epsilon^2}{\delta t} - \delta t V \right) \right] \psi(x + \epsilon; t) \\
&\quad \int \frac{d\epsilon}{A} e^{i\hbar^{-1} \frac{m}{2\delta t} \epsilon^2} [1 - \hbar^{-1} \delta t V + \dots] \left[ \psi(x; t) + \epsilon \psi'(x; t) + \frac{1}{2} \epsilon^2 \psi''(x; t) + \dots \right] \\
&\quad \Downarrow \quad \int \frac{d\epsilon}{A} e^{i\hbar^{-1} \frac{m}{2\delta t} \epsilon^2} = 1, \quad \int \frac{d\epsilon}{A} \epsilon^2 e^{i\hbar^{-1} \frac{m}{2\delta t} \epsilon^2} = i \frac{\delta t}{m} \hbar \\
&= \psi(x, t) - i\delta t \left[ \hbar^{-1} V \psi - \frac{\hbar}{2m} \psi'' \right]
\end{aligned}$$

上の式を整理すると：

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V \right] \psi$$

このことから、経路積分でも、波動関数とそれが従う Schrodinger 方程式が導かれることがわかる。

### 5.3 多点関数の生成汎関数

まず、時間順序積を導入：

$$T \left[ \hat{O}_1(t_1) \hat{O}_2(t_2) \right] \equiv \hat{O}_1(t_1) \hat{O}_2(t_2) \theta(t_1 - t_2) + \hat{O}_2(t_2) \hat{O}_1(t_1) \theta(t_1 - t_2)$$

3 個以上の演算子に対しても、同様に時間順序積を定義。

以下の  $n$  点関数を考える：

$$G^{(n)}(t_1, \dots, t_n) \equiv \langle x'; t' | T [\hat{x}_1(t_1) \hat{x}_2(t_2) \cdots \hat{x}_n(t_n)] | x; t \rangle$$

経路積分で考えると、たとえば  $t_1 > t_2 > \cdots > t_n$  のとき

$$\begin{aligned}
G^{(n)}(x_1, \cdots, x_n) &= \langle x'; t' | \hat{x}_1(t_1) \hat{x}_2(t_2) \cdots \hat{x}_n(t_n) | x; t \rangle \\
&= \langle x'; t' | \left( \int dy_1 |y_1; t_1\rangle \langle y_1; t_1| \right) \hat{x}_1(t_1) \left( \int dy_2 |y_2; t_2\rangle \langle y_2; t_2| \right) \hat{x}_2(t_2) \cdots | x; t \rangle \\
&= \int \mathcal{D}x x(t_1) \cdots x(t_n) e^{iS/\hbar}
\end{aligned}$$

従って、一般の時間順序に対して：

$$G^{(n)}(x_1, \cdots, x_n) = \int \mathcal{D}x x(t_1) \cdots x(t_n) e^{iS/\hbar}$$

$G^{(n)}$  の生成汎関数

$$Z[J] \equiv \int \mathcal{D}x \exp \left[ i\hbar^{-1} S + i \int dt J(t) x(t) \right]$$

$Z[J]$  は  $J(t)$  の汎関数。

すると：

$$G^{(n)}(x_1, \cdots, x_n) = \left[ \left( \frac{1}{i} \frac{\delta}{\delta J(t_1)} \right) \cdots \left( \frac{1}{i} \frac{\delta}{\delta J(t_n)} \right) Z[J] \right]_{J \rightarrow 0}.$$

以下の式を何度も使えば、上の式は導かれる：

$$\begin{aligned}
\frac{\delta}{\delta J(t_1)} &\equiv \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\epsilon} \{ Z[J(t) + \epsilon \delta(t - t_1)] - Z[J(t)] \} \\
&= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\epsilon} \int \mathcal{D}x \left[ \exp \left\{ i\hbar^{-1} S + \int dt (J(t) + \epsilon \delta(t - t_1)) x(t) \right\} \right. \\
&\quad \left. - \exp \left\{ i\hbar^{-1} S + \int dt J(t) x(t) \right\} \right] \\
&= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\epsilon} \int \mathcal{D}x \exp \left\{ i\hbar^{-1} S + \int dt J(t) x(t) \right\} [e^{i\epsilon x(t_1)} - 1] \\
&= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\epsilon} \int \mathcal{D}x x(t_1) \exp \left\{ i\hbar^{-1} S + \int dt J(t) x(t) \right\}
\end{aligned}$$

## 例：調和振動子

特に（量子力学なら）調和振動子の場合が重要：

$$H = \frac{1}{2} p^2 + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 = \left( \hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega$$

ここで

$$\hat{a} \equiv \frac{1}{\sqrt{2\hbar}} \left[ \sqrt{m\omega} \hat{x} + \frac{i}{\sqrt{m\omega}} \hat{p} \right], \quad \hat{a}^\dagger \equiv \frac{1}{\sqrt{2\hbar}} \left[ \sqrt{m\omega} \hat{x} - \frac{i}{\sqrt{m\omega}} \hat{p} \right]$$

交換関係：

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1$$

位置演算子、運動量演算子を  $\hat{a}$  と  $\hat{a}^\dagger$  で表すと

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\hat{a} + \hat{a}^\dagger), \quad \hat{p} = -i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} (\hat{a} - \hat{a}^\dagger)$$

以下、特に基底状態から基底状態への遷移を考える：

$$G^{(2)}(t) \equiv \langle 0 | T [\hat{x}(t) \hat{x}(0)] | 0 \rangle$$

正準量子化に基づく計算：

$$\begin{aligned} \langle 0 | [\hat{x}(t) \hat{x}(0)] | 0 \rangle &= \langle 0 | e^{i\hat{H}t/\hbar} \hat{x} e^{-i\hat{H}t/\hbar} \hat{x} | 0 \rangle \\ &\Downarrow \quad \hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\hat{a} + \hat{a}^\dagger) \\ &= \frac{\hbar}{2m\omega} \langle 0 | e^{i\hat{H}t/\hbar} \hat{a} e^{-i\hat{H}t/\hbar} \hat{a}^\dagger | 0 \rangle \\ &\Downarrow \quad \hat{H} | 0 \rangle = \frac{1}{2} \hbar \omega | 0 \rangle, \quad \hat{H} \hat{a}^\dagger | 0 \rangle = \frac{3}{2} \hbar \omega \hat{a}^\dagger | 0 \rangle \\ &= \frac{\hbar}{2m\omega} e^{-i\omega t} \end{aligned}$$

同様に

$$\langle 0 | [\hat{x}(0) \hat{x}(t)] | 0 \rangle = \frac{\hbar}{2m\omega} e^{i\omega t}$$

従って

$$\langle 0 | T [\hat{x}(t) \hat{x}(0)] | 0 \rangle = \frac{\hbar}{2m\omega} [e^{-i\omega t} \theta(t) + e^{i\omega t} \theta(-t)]$$

続いて、 $\langle 0 | T [\hat{x}(t) \hat{x}(0)] | 0 \rangle$  を経路積分で計算。

- $\langle \Psi_f; t_f | T [\hat{x}(t) \hat{x}(0)] | \Psi_i; t_i \rangle$  から出発。



- 始状態と終状態から真空を抜き出す。

$-i\epsilon$  処方：

- $\omega^2$  を  $\omega^2 - i\epsilon$  で置き換える。
- $\epsilon$  は正の微小パラメータ、計算の最後にゼロとする。
- 合わせて、 $t_i \rightarrow -\infty$ 、 $t_f \rightarrow +\infty$

Hamiltonian：

$$\hat{H} = \frac{1}{2}\hat{p}^2 + \frac{1}{2}m(\omega^2 - i\epsilon)\hat{x}^2 \equiv \hat{H} - \frac{1}{2}im\omega^2\epsilon\hat{x}^2$$

こうすると、始状態と終状態から真空のみが残る。

- Hamiltonian の固有状態： $\hat{H} |n\rangle' = E'_n |n\rangle'$
- 摂動論をつかうと：

$$|n\rangle' = \frac{1}{\sqrt{n}}(a^\dagger)^n |0\rangle + O(\epsilon) \equiv |n\rangle + O(\epsilon)$$

$$E'_n = E_n + \langle n | (-i\epsilon m \hat{x}^2 / 2) | n \rangle + O(\epsilon^2) = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega - \frac{i\hbar}{2\omega}\epsilon \left(n + \frac{1}{2}\right)$$

- $|\Psi_i\rangle$  を Hamiltonian の固有状態で展開すると：

$$\begin{aligned} |\Psi_i; t_i\rangle &= \sum_n e^{iE'_n t_i} |E'_n\rangle \langle E'_n | \Psi_i \rangle \\ &= \sum_n \exp\left(\frac{\hbar}{2\omega}\epsilon \left(n + \frac{1}{2}\right) t_i\right) e^{iE_n t_i} |E'_n\rangle \langle E'_n | \Psi_i \rangle \end{aligned}$$

- $t_i \rightarrow -infty$  とすると、 $n = 0$ （最低エネルギー状態）が効く。
- $\langle \Psi_f |$  も、同様のふるまい。

式で書くと：

$$\langle \Psi_f; t_f | T[\cdots] | \Psi_i; t_i \rangle \big|_{\omega^2 \rightarrow \omega^2 - i\epsilon, t_i \rightarrow -\infty, t_f \rightarrow +\infty} \propto \langle 0 | T[\cdots] | 0 \rangle$$

生成汎関数（with  $-i\epsilon$  prescription）

$$Z[J] = N \int \mathcal{D}x \exp \left[ i\hbar^{-1} \int dt \left( \frac{1}{2}m\dot{x}^2 - \frac{1}{2}m(\omega^2 - i\epsilon)x^2 + Jx \right) \right]$$

ただし、 $N$  は規格化因子

$$J[0] = \langle 0|0 \rangle = 1 \quad \Rightarrow \quad N = \left[ \int \mathcal{D}x e^{iS/\hbar} \right]^{-1}$$

Fourier 変換を用いて、経路積分を定義：

- $f(t) = \int \frac{dk}{2\pi} e^{-ikt} \tilde{f}(k) \quad \Leftrightarrow \quad \tilde{f}(k) = \int dt e^{ikt} f(t)$
- 特に、 $f(t)$  が実数関数なら  $\tilde{f}^*(k) = \tilde{f}(-k)$

経路積分（全ての経路についての積分）：

$$\int \mathcal{D}x \rightarrow \prod_k \int d\tilde{x}_k$$

Fourier 振幅を用いると：

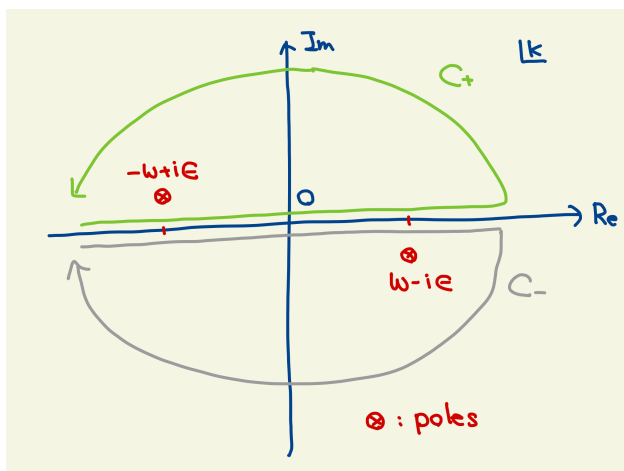
$$\begin{aligned} S_J &\equiv \int dt \left[ \frac{1}{2} m \dot{x}^2 - \frac{1}{2} m (\omega^2 - i\epsilon) x^2 + Jx \right] \\ &= \int dt \frac{dk}{2\pi} \frac{dk'}{2\pi} \left[ \frac{1}{2} m(ik)(ik') \tilde{x}(k) \tilde{x}(k') e^{-i(k+k')t} - \frac{1}{2} m(\omega^2 - i\epsilon) \tilde{x}(k) \tilde{x}(k') e^{-i(k+k')t} \right. \\ &\quad \left. + \tilde{J}(k) \tilde{x}(k') e^{-i(k+k')t} \right] \\ &= \int \frac{dk}{2\pi} \left[ \frac{1}{2} m k^2 |\tilde{x}(k)|^2 - \frac{1}{2} m (\omega^2 - i\epsilon) |\tilde{x}(k)|^2 + \tilde{J}^*(k) \tilde{x}(k) \right] \\ &= \int \frac{dk}{2\pi} \left[ \frac{1}{2} m \{k^2 - (\omega^2 - i\epsilon)\} \left\{ \tilde{x}(k) + \frac{1}{m(k^2 - \omega^2 + i\epsilon)} \tilde{J}(k) \right\} \right. \\ &\quad \left. \left\{ \tilde{x}(-k) + \frac{1}{m(k^2 - \omega^2 + i\epsilon)} \tilde{J}(-k) \right\} - \tilde{J}(-k) \frac{1}{2m(k^2 - \omega^2 + i\epsilon)} \tilde{J}(k) \right] \end{aligned}$$

経路積分を行うと、第1項はガウス積分に伴っていなくなることを考慮すると：

$$\begin{aligned} Z[J] &= N \int \mathcal{D}x e^{iS_J/\hbar} \\ &= \exp \left[ -i\hbar^{-1} \int \frac{dk}{2\pi} \tilde{J}(-k) \frac{1}{2m(k^2 - \omega^2 + i\epsilon)} \tilde{J}(k) \right] \\ &= \exp \left[ -i\hbar^{-1} \int \frac{dk}{2\pi} dt dt' J(t) e^{-ikt} \frac{1}{2m(k^2 - \omega^2 + i\epsilon)} J(t') e^{ikt'} \right] \end{aligned}$$

2点関数：

$$\begin{aligned}
 \langle 0|T[\cdots]|0\rangle &= (\hbar/i)^2 \frac{\delta}{\delta J(t)} \frac{\delta}{\delta J(0)} Z[J] \Big|_{J=0} \\
 &= -\hbar^2 \times (-i\hbar^{-1}) \int \frac{dk}{2\pi} \frac{1}{2m(k^2 - \omega^2 + i\epsilon)} (e^{ikt} + e^{-ikt}) \\
 &= \frac{i\hbar}{2m} \int \frac{dk}{2\pi} \frac{1}{2\omega} \left[ \frac{1}{k - (\omega - i\epsilon)} - \frac{1}{k + (\omega - i\epsilon)} \right] (e^{ikt} + e^{-ikt})
 \end{aligned}$$



まず  $t > 0$  のとき：

$$\langle 0|T[\cdots]|0\rangle_{t>0} = \frac{i}{4m\omega} \left[ - \int_{C_+} \frac{dk}{2\pi} \frac{e^{ikt}}{k + (\omega - i\epsilon)} + \int_{C_-} \frac{dk}{2\pi} \frac{e^{-ikt}}{k - (\omega - i\epsilon)} \right] = \frac{\hbar}{2m\omega} e^{-i\omega t}$$

同様に  $t < 0$  のとき：

$$\langle 0|T[\cdots]|0\rangle_{t<0} = \frac{\hbar}{2m\omega} e^{i\omega t}$$

まとめると：

$$\langle 0|T[\hat{x}(t)\hat{x}(0)]|0\rangle = \frac{\hbar}{2m\omega} [e^{-i\omega t}\theta(t) + e^{i\omega t}\theta(-t)]$$

これは、正準量子化に基づいて計算した結果と一致。