

3. 4. 密度演算子行列要素の運動方程式

密度演算子の行列要素が従う運動方程式を見つけよう。そのために ρ_{nm} の時間微分をとってみる。それに $i\hbar$ をかけたものは次のようになる。

$$i\hbar \frac{d\rho_{nm}}{dt} = (H\rho - \rho H)_{nm} \quad (1)$$

演習 3-4

1 式 (1) を導け。

ヒント：まず ρ_{nm} の定義式で時間に依存する因子がどれか調べよ。そのために展開係

数 $C_n^{(\nu)}$ が $\iiint \phi_n^* \psi^{(\nu)} d\mathbf{r}$ で与えられること、 $\psi^{(\nu)}$ はシュレーディンガ方程式

$$i\hbar \frac{d\psi^{(\nu)}}{dt} = H\psi^{(\nu)}$$

にしたがって時間変化することに注意せよ。その上で微分を実行し、

シュレーディンガ方程式を代入せよ。次に $\psi = \sum_n C_n \phi_n$ を用い、ハミルトニアンがエルミート演算子であることを用いよ。

3. 5. 密度行列要素とその初期条件

密度演算子の対角要素 $\rho_{nn} = \sum_{\nu} p_{\nu} |C_n^{(\nu)}|^2$ は、 n がエネルギー固有状態のラベルである

場合、エネルギー測定した結果 n 番目のエネルギー固有状態に見いだされる量子論的および古典的な二重の意味の確率である。

N 個の粒子からなる多粒子系で n 番目のエネルギー固有状態にある粒子の数は $N\rho_{nn}$ である。一方、非対角要素

$$\rho_{mn} = \sum_{\nu} p_{\nu} C_m^{(\nu)} C_n^{(\nu)*} = \sum_{\nu} p_{\nu} |C_m^{(\nu)}| |C_n^{(\nu)}| \exp(i\vartheta_m^{(\nu)} - i\vartheta_n^{(\nu)})$$

は各固有状態の係数の位相情報を含んでいる。二つの異なる状態の展開係数の位相差が確定している場合には有限値をもつが、位相差が確定していない、あるいは相関がない場合には平均をとると零になる。したがって非対角要素は展開係数間の位相の相関の強さを表している。

例えば、エネルギー固有状態で展開する場合、異なるエネルギー状態の展開係数の絶対値の割合は統計的に指定できるけれども、位相関係は指定できない。すなわち、 $\vartheta_m^{(\nu)} - \vartheta_n^{(\nu)}$ の値は指定できず、 ν によってこの位相差はランダムに変化し、 $\exp(i\vartheta_m^{(\nu)} - i\vartheta_n^{(\nu)})$ の平均値は零になる。そこで非対角要素の初期条件は零とする。

