量子力学第三

2017年2月20日版

高橋 和孝

東京工業大学

量子力学第三

高橋 和孝

(C) Kazutaka Takahashi 2016, 2017

はじめに

このノートは東京工業大学理学院物理学系において 2016 年度の第3クォーターに行われる講義「量子力 学第三」についての講義ノートである。「量子力学第一」、「量子力学第二」を履修してきた学部3年生向け の講義となる。内容は大きく分けて三つあり、摂動などの近似法、多体系の記述法と性質、量子もつれを はじめとした量子情報・計算に関わる問題となる。

第I部では近似法を扱う。摂動などの近似法は量子力学を修めるためには必ずおさえておくべき方法で ある。近似とはいえ、量子力学系の奇妙な性質を理解するのにたいへん便利な方法である。他の部と比べ ると地味ではあるが本講義の中で最も重要である。また、他の教科書ではあまり議論されていない時間に 依存する系の扱いを比較的詳しく議論しているのが特色のひとつとなる。

第 II 部では多体系を扱う。「熱・統計力学第二」で量子統計とよばれる性質を扱い、Fermi 面の概念や Bose-Einstein 凝縮の現象などを学んだ。ここではあらためて量子統計によってもたらされる性質を調べ る。特に、場の演算子の導入は量子系の本質を理解するには欠かせない手法である。これによって電磁場 の理論との融合が可能になる。場の形式を用いた応用は膨大なものがあり、本講義の範囲外にある。実際 この内容は大学院で詳しく扱うことが多い。応用もいくつか扱うが系統的ではない。詳しくは大学院講義 「多体系の量子力学」および「場の理論」を履修してほしい。ここでは場の理論の意義や有用性を理解すれ ば十分である。

第 III 部では「量子力学の原理をめぐって」という題で近年の量子情報・量子計算につながる話題を扱う。これは量子力学の性質を積極的に用いて新しい概念・技術を生み出そうという試みである。そのような試みは量子力学の本質を浮き彫りにしてくれる。通常の学部の講義では扱われないことがほとんどであるが、本講義ではあえて入れてみた。このような知識は量子力学を学ぶ全ての人にとって常識になりつつあるからである。完全に理解しなくても「量子力学的」であるとはどういうことか考えるきっかけとなれば講義の目的は達成される。

多くの内容をつめこみすぎかもしれないので、消化しきれなかったら第I部に集中してほしい。他は大 学院でも詳しく学ぶ機会があるはずである。

どの章にも章末問題が5、6問程度ある。同時に担当する「量子力学演習第三(B)」ではこの問題の一部 を解くことにする。演習を受講しなくても解けば理解が深まるだろう。難易度で三つに分けているのでと りあえず簡単な[A]の問題だけでも解けばそれなりに力がつくはずである。もっとも、演習では[B]の問題 を解くのでそれくらいまでできるようになってほしい。

ちょっとした事情と偶然からこの講義を担当することになった。おそらく今年だけなので、この講義を受ける方は運がたいへんよいかたいへん悪いかのどちらかだろう。以前に演習は担当したことがあったので問題はある程度揃っており、それを元にして講義ノートを作成した。とても楽しい経験であった。問題ばかりつくっていると技工にはしってしまうので講義をやると戒めになる。実るかどうかわからないが研究の種もできた。3か月以上かけて講義ノートを準備してきたが、まだまだ不備が多いはずである。講義終了後に、講義中に気づいた間違い等を修正して再度公開する予定である。なのでこれはまだ暫定版である。

2016年9月

講義終了後、明らかな間違いを訂正し、いくつかの細かい点を修正した。また、新しい問題と第14章の 追加も行っている。演習の発表から生まれた問題もある。講義・演習に出席してくれたみなさん、内容に ついてコメントをしてくれたみなさん、ありがとうございました。またの機会に修正を行いたいので、引 き続きコメントがあればお知らせ下さい。

> 2016 年 12 月 高橋 和孝

目 次

第1章	概論 1
1.1	概要
	1.1.1 量子力学の原理
	1.1.2 近似手法
	1.1.3 多体系
	1.1.4 再び:量子力学の原理 12
1.2	まとめ
	1.2.1 調和振動子
	1.2.2 角運動量とスピン
	1.2.3 水素原子
1.3	構成
1.4	参考書
1.5	問題
筜Τ动	近似注
유고마	25 25
第2章	定常状態の摂動論 (1) 27
2.1	問題設定
2.2	束縛状態における摂動論: 縮退のないとき
	2.2.1 摂動展開
	2.2.2 一般論*
2.3	例
	2.3.1 調和振動子
	2.3.2 Stark 効果
2.4	問題
第3章	「定常状態の摂動論(2) 43
3.1	束縛状態における摂動論: 縮退のあるとき
3.2	$[\eta] \qquad \qquad$
	3.2.1 3準位の糸
	3.2.2 Stark 効果
3.3	問題
第4音	時間に依存する系の摂動論 51
4 1	時間依存 Schrödinger 方程式 51
	411 定堂状態と非定堂状態 51
	41.2 掲動展開 53
	41.3 時間発展演算子と時間順序積*
	4.1.4 相互作用描像*
4.2	時間依存摂動の例

	4.2.1 有限時間に働く摂動	56
	4.2.2 周期変化する摂動	57
4.3	問題	59
第5章	時間に依存する系	63
5.1	2 準位系	63
5.2	断熱近似	64
	5.2.1 断熱状態	64
	5.2.2 Berry 位相*	66
5.3	STIRAP*	68
5.4	時間周期系*	71
5.5	問題	74
0.0		11
第6章	变分法	77
5.5 第 6 章 6.1	変分法 変分原理	77 77
5.5 第 6 章 6.1	変分法 変分原理 6.1.1	77 77 77 77
5.5 第 6 章 6.1	変分法 変分原理 6.1.1 一般論 6.1.2	77 77 77 77 78
第6章 6.1	変分法 変分原理 6.1.1 一般論 6.1.2 例 6.1.3 励起状態*	77 77 77 77 78 79
第6章 6.1	変分法 変分原理	77 77 77 78 79 80
第6章 6.1 6.2	変分法 変分原理 6.1.1 一般論 6.1.2 例 6.1.3 励起状態* 6.1.4 Rayleigh-Ritz の変分法 平均場近似	77 77 77 78 79 80 81
第6章 6.1 6.2	変分法 変分原理 6.1.1 一般論 6.1.2 例 6.1.3 励起状態* 6.1.4 Rayleigh-Ritz の変分法 平均場近似 6.2.1 Hartree 近似	77 77 77 78 79 80 81 81
5.5 第 6 章 6.1 6.2	変分法 変分原理 6.1.1 一般論 6.1.2 例 6.1.3 励起状態* 6.1.4 Rayleigh-Ritz の変分法 平均場近似 6.2.1 Hartree 近似 6.2.2 2粒子系	77 77 77 78 79 80 81 81 83

第II部 多体系

87

 	同種粒子 89
7.1	Bose · Fermi 粒子
	7.1.1 同種粒子とハミルトニアン89
	7.1.2 同種粒子と波動関数 90
	7.1.3 複合粒子の統計
7.2	多粒子系の波動関数
7.3	相互作用する 2 粒子の系
7.4	問題
第8章	場の演算子と量子化 101
81	
0.1	場の演算子
0.1	場の演算子
0.1	場の演算子
0.1	場の演算子 101 8.1.1 状態の表現 101 8.1.2 場の演算子 101 8.1.3 物理量の表現 104
0.1	場の演算子 101 8.1.1 状態の表現 101 8.1.2 場の演算子 102 8.1.3 物理量の表現 104 8.1.4 生成消滅演算子 106
0.1	場の演算子 101 8.1.1 状態の表現 101 8.1.2 場の演算子 102 8.1.3 物理量の表現 104 8.1.4 生成消滅演算子 106 8.1.5 場の演算子の意味 107
8.2	場の演算子 101 8.1.1 状態の表現 101 8.1.2 場の演算子 102 8.1.3 物理量の表現 104 8.1.4 生成消滅演算子 106 8.1.5 場の演算子の意味 107 場の量子化* 108

		9.2.1	自由下の	ermi 🕱	ξ												•									115
		9.2.2	基底の	変換と	:反粒	子・	準	粒子	Ζ.								•									117
		9.2.3	相互作	用													•									117
	9.3	問題 .															•	• •					•			122
第	10 章	多体系	の量子ス	力学: [;]	磁性																					125
	10.1	強結合	模型 .														•									125
		10.1.1	強結合	模型													•									125
		10.1.2	交換相	互作用	3.												•									126
		10.1.3	超交換	相互作	₣用*												•									127
	10.2	磁性体	の模型														•									129
	10.3	問題 .															•									132
	10.3	問題.												• •		• •	•				•	• •	•	• •		132
第	10.3 III ;	問題 . 邹 量 子力学	 ⁵ の原	···· 〔理を	 め	 ۲`۰	 วて									•]	132 L 35
第 第	10.3 III音 11章	問題 3 量 密度演: 子力学 _{算子}	 ⁵ の原	 〔理を	 め	 ۲	 って													•					132 L 35 137
第 第	10.3 III音 11.1 11.1	問題 部 密度演 : 密度演	····· 子力学 算子 算子 ·	・・・ ^全 の原	 理を 	 め	 <**-	 סכ] 	132 1 35 1 37 137
第 第	10.3 III音 11章 11.1 11.2	問題 ····································	・・・・ 子力学 算子 影子 ま こ こ こ こ こ こ こ こ こ こ こ こ	 ∲の原 ≦状態	 理を 	・・ め	· · ·	 ככ 		· · ·	· · ·		· · ·	· · ·			· •	 	· · ·	· · ·		· ·	•] 	132 L 35 137 137 139
第 第	10.3 III音 11章 11.1 11.2	問題 · 部 量 密度演算 純粋状! 11.2.1	・・・・ 子力学 算子 調子 態と混れ 確率分	・・・ 全の原 ・・・ 影密	理を	··· め ··· 算		 		· · · · · · · · · · · · · · · · · · ·	· · ·	· · ·	· · ·	· · ·	· · ·	· · ·	· •	· · ·	· · ·	· · ·		· · ·	•	· · ·	· · ·] 	132 1 35 1 37 137 139 139
第 第	10.3 III音 11章 11.1 11.2	問題 · · 部 量 密度演 納 約 11.2.1 11.2.2	・・・ 力学 手 算 静 確 密度	・・・ ●の原 ・・ 状と 密 の の の の の の の の の の の の の	… 理 を … … 度 義	・・ め ・・ 算子	<pre> · · · · · · · · · · · · · · · · · </pre>	 		· · · · ·	· · · · ·	· · · · · · · · · · · · · · · · · · ·	· · · · · · ·	· · ·	· · · · ·	· · · · · · · · · · · · · · · · · · ·	•	· · · · · ·	· · · · · · · · ·	· · · · ·		· · · · · · · · · · · · · · · · · · ·	•	· · ·	· · ·] · · · . · ·	 132 135 137 137 139 140
第 第	10.3 III 音 11.1 11.2 11.3	問題 · 部 室度演算 部 11.2.1 11.2.2 応用 ·	・・・・ 子力学 子子 経 密度 に ・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	・・・ 全の原 ・・・ い 、 い 影 密 子 の 原 ・・・ 、 い 影 密 子 の 原 ・・・ 、 い い い い い い い い い い い い い		・・ ・・ 算・・・	<pre></pre> <pre></pre> <pre></pre> <pre></pre> <pre></pre> <pre></pre> <pre></pre> <pre></pre>	 כל 		· · · · · · · ·	· · · · · · · ·	· · · · · · · ·	· · · · · · ·	· · · · · · · · · · · · · · · · · · ·	· · · · · · ·	· · · · · · ·		· · · · · ·	· · · · · · · · ·	· · · · ·	· · ·	· · · · · · · · · · · · · · · · · · ·	•	· · ·	· · ·] · · · . · ·	 132 135 137 137 139 139 140 141
第 第	10.3 III音 11章 11.1 11.2 11.3	問題 · · 部 量 密度度減 11.2.1 11.2.2 応用 · 11.3.1	・・・・ 子 子 子 子 に 和 子 に 和 子 に れ の に の に の の の の の の の の の の の の の の	・・・ の の い 状 と 子 ・・ く ト	· · · · · · · · · · · · · · · · · · ·	・・ ・・ ジン・・ ・・ ・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	<pre></pre>	 כל 		· · · · · · · ·	· · · · · · ·	· · · · · · · · · · · · · · · · · · ·	· · · · · · · · · · · · · · · · · · ·	· · ·	· · · · · · · · ·	· · · · · · ·	· · ·	· · · · · · · · ·	· · ·	· · · · · · ·	· · · ·	· · · · · · · · ·	•		· · · . · · . · · . · ·	 132 135 137 139 140 141 141
第 第	10.3 III音 11.1 11.2 11.3	問題 · · 部 量 密度度減 11.2.1 11.2.2 応用 · 11.3.1 11.3.2	・・・・ 子 子 子 子 と 率 度 ・・・ Bloch・ 角	・ の ・ 状と子・ ク距の ・ 影 密の ・ 影 密の ・ ト 離	理 度定	・・ ・・ ・・ ・・ ・・ ・・ ・・ ・・ ・・ ・・	 	 		· · · · · · · · ·	· · · · · · · · ·	· · · · · · · · · · ·	· · · · · · · · ·	· · ·	· · · · · · · · ·	· · · · · · ·	· · ·	· · · · · · · · ·	· · · · · · · · · · · · · · · · · · ·	· · · · · · · · ·	· · · ·	· · · · · · · · · · ·	•	· · ·	· · · 1 · · · · · · ·	 132 135 137 137 139 139 140 141 141 143

 9.1 原子の構造
 114

 9.2 多体電子系
 115

114

第9章 多体系の量子力学:電子系

11.	4 問題	145
第 12 5	章 量子もつれと Bell の不等式 1	.49
12.	1 量子もつれ	149
	12.1.1 合成系の記述	149
	12.1.2 特異値分解	151
	12.1.3 縮約密度演算子とエンタングルメントエントロピー	153
12.	2 EPR パラドックスと Bell の不等式	154
	12.2.1 EPR パラドックス	154
	12.2.2 Bell の不等式	155
12.	3 問題	157
第 13 ፤	章 量子計算 1	.60
13.	1 量子回路	160
13.	2 量子テレポーテーション	162
13.	3 問題	164
第141	章 量子測定 1	.66
14.	1 間接測定	166
	14.1.1 間接測定の模型	166
	14.1.2 例	168
14.	2 不確定性関係	169

<i>(</i> .+	∧ E¢	₩□±≐ᢞ	臣全日日日百																			1/	75
	14.3	問題.										 									 	. 1	72
		14.2.2	誤差と	擾乱				•			•	 	•					 •			 •	. 1	70
		14.2.1	Kenna	rd–R	ober	tsor	າ	不領	等式	, .		 	•					 •	•	 •	 •	. 1	70

v

第1章 概論

量子力学の基本原理は、「量子力学第一」・「量子力学第二」の講義等で扱ってきたものが全てである。そ のうえでまだ何か理解すべき問題が残されているのだろうか?もちろん、量子力学の奥深さ・幅広さはは かりしれないものがあり話題は尽きないが、これからさまざまな分野の研究に関わることになる学生に共 通因子として何を与えるべきかを考えると、話題は自然と限られてくる。本章では量子力学の原理を簡単 に復習した後、この講義でどのような問題を議論するべきかを考察する。また、各章の内容、参考書、講 義に付随する情報などについてもまとめる。

1.1 概要

1.1.1 量子力学の原理

簡単に量子力学の原理をふりかえってみよう。特に新しいことはないのでとばしてもさしつかえない¹。

状態と物理量

量子状態(quantum state)は **Hilbert** 空間(Hilbert space)において定義されるベクトル $|\psi\rangle$ として 表現される。状態は縦ベクトルとして表され、成分の数が Hilbert 空間の次元となる。スピンのような(部 分)空間は有限であるが、通常は無限次元の空間を考える。Hilbert 空間の次元は空間座標の次元とは関係 ない。どのような Hilbert 空間を扱うかは考える系(物理量)によって異なる²。

「状態」というものの実体は不明であるが、そこからどのように物理量が引き出されるかさえわかればそれで十分である。むしろそのようにして状態が規定される³。重要なのは計算規則である。状態ベクトルは線形性をもち内積 (inner product) が定義されている⁴。すなわち、 $|\psi\rangle$ の共役 (conjugate) ベクトル $\langle\psi|$ とベクトル $|\phi\rangle$ の間で内積を考えると

$$\langle \psi | \phi \rangle = C \tag{1.1}$$

というように複素数 C を得る。状態ベクトルが縦ベクトルの場合、共役ベクトルは横ベクトルとなる⁵。複素共役は

$$\langle \psi | \phi \rangle^* = \langle \phi | \psi \rangle = C^* \tag{1.2}$$

で与えられる。自分自身との内積は非負の実数であり、その値が1となることを状態が規格化(normalization) されているという。

$$\langle \psi | \psi \rangle = 1 \tag{1.3}$$

¹そもそも本章の全てをとばしても特に問題はない。既に各章を理解したいという衝動をもっているひとはさっさと先へ進んでも らいたい。

²むしろ、現在の量子力学の定式化では、Hilbert 空間が与えられたときその空間に作用する演算子(=物理量)が決まるとした 方が自然である。独立な演算子の数は Hilbert 空間の次元によって決まる。

³この点は古典物理学と大きく異なるところであり、量子力学をはじめて学ぶときにとまどうところでもある。結局のところ、物 理学は現象を説明または予言できればよく、状態とは何か、なぜそのような理論でなければならないかなどを問うても無駄である。 その理論でいろいろな現象を説明できるからそれでよいと言うしかない。

 $^{^4}$ このあたりの性質は量子力学とは独立に Hilbert 空間の理論で全て規定されている。そもそも Hilbert 空間論は量子力学ができる以前からあったものである。もともと存在していた数学をうまく利用して量子力学ができたという事実は興味深い。 5 転置および複素共役をとる。物理では † で表される。つまり、 $(|\psi\rangle)^{\dagger} = \langle \psi |_{\circ}$

状態の定数倍には物理的な意味がないのでこのように規格化を行う。位相の不定性は残るがそれにも意味 はないので適当に決める⁶。規格化は以下で述べるように確率の保存を示している。

状態ベクトルは重ねあわせの原理 (superposition principle) に従う。すなわち、二つの状態 $|\psi_1\rangle$ 、 $|\psi_2\rangle$ から異なる状態

$$|\psi\rangle = a|\psi_1\rangle + b|\psi_2\rangle \tag{1.4}$$

をつくることができる。a、b は複素数を表す。これは $|\psi_1\rangle$ でも $|\psi_2\rangle$ でもないが両者の性質を反映した量 子力学ならではの状態である。このような状態がいかに非自明な性質をもたらすかをさまざまな例で理解 することが本講義の目的のひとつとなる。

物理量 X は状態に作用するエルミート演算子 (Hermitian operator) \hat{X} として表される。演算子は具体的な値をとらず、状態に作用して異なる状態への写像を与えるものである。

$$|\psi\rangle \to |\psi'\rangle = \hat{X}|\psi\rangle \tag{1.5}$$

その写像の性質によって演算子の性質が規定される。物理量のとりうる値は演算子の固有値(eigenvalue) で決まる。

$$\hat{X}|n\rangle = x_n|n\rangle \tag{1.6}$$

 $|n\rangle$ は固有状態 (eigenstate)、固有ベクトル (eigenvector)を表す。エルミート演算子であることが固有 値が実数であることを保証している。エルミート演算子とは演算子 \hat{X} がそのエルミート共役 (Hermitian conjugate) 演算子 \hat{X}^{\dagger} と等しいものをいう。エルミート共役演算子は次の関係によって定義される。

$$\langle \psi | \hat{X} | \phi \rangle^* = \langle \phi | \hat{X}^{\dagger} | \psi \rangle \tag{1.7}$$

 $|\psi\rangle \geq |\phi\rangle$ は任意の状態を表す⁷。

固有値方程式を解いてとりうる固有値 x_n と固有状態 $|n\rangle$ が全て求まったとする。固有状態 $|n\rangle$ は状態の 定義されている Hilbert 空間において定義されるベクトルである。考えている Hilbert 空間においてエル ミート演算子の固有関数は一般に完全性 (completeness relation)をもつ。完全系をなすともいう。つま り、独立な固有状態の数(指標 n のとりうる数)は Hilbert 空間の次元だけ存在する⁸。また、固有状態は 正規直交関係、正規直交性 (orthonormal relation)を満たすようにとることができる。

$$\langle m|n\rangle = \delta_{m,n} \tag{1.8}$$

完全性は次のように表される。

$$\sum_{n} |n\rangle\langle n| = 1 \tag{1.9}$$

Hilbert 空間の次元が無限大のときは固有関数も無限大になる。その場合数学的な注意が必要であるが、ここではそれについて議論しない。無限次元系の問題については必要に応じてその都度述べる。

完全性を用いると任意の状態を固有関数を用いて表現することができる。

$$\psi\rangle = \sum_{n} |n\rangle\langle n|\psi\rangle \tag{1.10}$$

この状態に演算子 X を作用させると

$$\hat{X}|\psi\rangle = \sum_{n} x_{n}|n\rangle\langle n|\psi\rangle \tag{1.11}$$

⁶相対的な位相には意味がある。例えば、時間発展を考えたときに生じる位相変化を測定できることもある。

⁷任意の状態という点に注意。ある特定の状態に対してではなくどんなものをとってきても成り立つ。

⁸したがって、有限次元の系ではとりうる固有値(=物理量の値)は不連続となる。ただし、無限次元でも不連続になることもある。例えば調和振動子のエネルギー固有状態は離散無限個ある。

である。つまり、一般に状態 $|\psi\rangle$ において物理量 X を測定すると得られる値は確定した値をとらない。 x_n のいずれかが測定される。測定によって得られる X の期待値は

$$\langle \hat{X} \rangle = \langle \psi | \hat{X} | \psi \rangle = \sum_{n} x_{n} p_{n}$$
(1.12)

と書けて、 x_n を得る確率が

$$p_n = |\langle n|\psi\rangle|^2 \tag{1.13}$$

で与えられる。このように、量子力学では物理量は一般に確定した値をとらないから、一回の測定を行ったときにどの値が得られるか予言することができない。予言できるのはその値をとる確率である。X についての確率分布は演算子と状態を用いて

$$P(x) = \sum_{n} \delta(x - x_n) p_n = \langle \psi | \delta(x - \hat{X}) | \psi \rangle$$
(1.14)

と書くことができる。量子力学の体系はこれを求めるためにある。

状態は Hilbert 空間上で定義された抽象的なものであるが、特定の表現を考えることができて、その標準的な例が座標表示の波動関数 (wave function)である。座標表示を定義するためには座標演算子の固有状態を用いる。

$$\hat{x}|x\rangle = x|x\rangle \tag{1.15}$$

x は任意の実数である。つまり、固有値は連続無限に存在する。この固有状態は内積をとると

$$\langle x|x'\rangle = \delta(x - x') \tag{1.16}$$

のようにデルタ関数 (delta function) で表され、*x* = *x'* で発散してしまう。これは無限次元の空間を考えていること、つまり座標が連続無限の値をとることができることに起因するものである。規格化することができないが、上記のデルタ関数の表現によって実質的に規格化されたものとみなされる。この座標演算子の固有状態を用いて波動関数は次のように定義される。

$$\psi(x) = \langle x | \psi \rangle \tag{1.17}$$

抽象的な状態がxの関数として表される。この波動関数を用いると、状態 $|\psi\rangle$ によって記述される粒子を 座標x に見出す確率密度は

$$P(x) = \langle \psi | \delta(x - \hat{x}) | \psi \rangle = \int \mathrm{d}x' \, \langle \psi | \delta(x - \hat{x}) | x' \rangle \langle x' | \psi \rangle = \int \mathrm{d}x' \, \delta(x - x') | \langle x' | \psi \rangle |^2 = |\psi(x)|^2 \quad (1.18)$$

によって与えられる。波動関数が完全に決まれば任意の物理量の確率分布を原理的には決定することがで きる。問題によっては状態の代わりに波動関数を求める方が実用的に便利であるし、直観的な理解が得ら れることも多い。

ここまででも量子力学が古典物理学から大きく外れた理論であることがわかるが、量子力学がさらに奇妙であるのは系が測定によって影響を受けることである。測定による系への反作用は原理的に避けられないものとなる。 $|\psi\rangle$ に対して \hat{X} を測定して x_n の値を得たとき、状態はその固有状態に瞬間的に変化する。これを射影仮設 (projection postulate) あるいは波束 (波動関数)の収縮 (wave function collapse) などともよぶ。式で表すと次のようになる。

$$|\psi\rangle \to \frac{\hat{P}_n |\psi\rangle}{\sqrt{\langle\psi|\hat{P}_n|\psi\rangle}}, \qquad \hat{P}_n = |n\rangle\langle n|$$
(1.19)

P_n は射影演算子 (projection operator)を表す。分母は規格化のためにいれた。状態の規格化は確率の保存のために必要とされる。このように1回の測定によって状態は影響を受けてしまうため、上記で計算した期待値などの値を実験で再現しようと思ったら、全く同じ状態を何個も用意して測定をそれぞれの状態に対して独立に行う必要がある。一回測定したらその状態はもう元のものとは異なる状態である。このような性質は、測定による影響を考慮していない古典力学とは全く異なるものである。量子力学では測定とは何かをきちんと定義する必要がある。

交換関係

演算子の性質は交換関係 (commutation relation)によって規定される。もっとも基本的なのは座標演算子 \hat{x} と運動量演算子 \hat{p} の間の交換関係

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar \tag{1.20}$$

である⁹。 $\hbar \approx 1.05 \times 10^{-34}$ J·s は量子力学を定量的に特徴づける Planck 定数 (Planck constant) である¹⁰。左辺の交換子は

$$[\hat{A},\hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} \tag{1.21}$$

と定義される。二つの演算子の交換関係が0にならないということは、演算子が普通の数とは異なるもの であることを意味している。互いに交換しない演算子は同時固有状態をとることができない。つまり、そ れらの演算子に対応する物理量は同時に確定した値をもたない。交換する場合は同時固有状態をとること ができる¹¹。

演算子が交換しないとき、両者の物理量は同時に確定した値をとることができない。このため、次のようないわゆる不確定性関係(uncertainty relation)が成り立つ(問題[1-1])。

$$\sigma(x)\sigma(p) \ge \frac{\hbar}{2} \tag{1.22}$$

 $\sigma(x) = \sqrt{\langle \hat{x}^2 \rangle - \langle \hat{x} \rangle^2}$ である。 $\sigma(p)$ も同様。これは2乗ゆらぎ(分散)を表す量である。xが確定した値をとるほど p はゆらぐし、p を確定させると今度は x がゆらぐ。いわゆる不確定性関係としたのは、これは Heisenberg が考察した不確定性関係とは異なるからである。測定することで状態が変化してしまうということを考慮すると、上の関係式は1回の測定だけで示されるものではない。同一の状態をたくさん用意してそれぞれ xを測ったときの $\sigma(x)$ と、またたくさん用意してそれぞれ pを測ったときの $\sigma(p)$ について成り立つ関係である。Heisenberg の不確定性関係は $x \ge p$ をひとつの系で同時に測定したときにそれぞれがどのような値をとりうるかを述べた関係である。上の関係では精密な測定を行って物理量の値をあいまいさなく得ることができることを暗黙の仮定としている。測定が及ぼす影響を一切考慮していないことからも Heisenberg の不確定性関係とは異なることがわかるだろう。測定過程を考慮した不確定性関係の具体的な表現は別に考えられている¹²。

座標表示において、座標演算子 \hat{x} はc数変数xであるが、運動量演算子は座標についての微分で表される。つまり、

$$\langle x|\hat{x} = x\langle x| \tag{1.23}$$

$$\langle x|\hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \langle x| \tag{1.24}$$

である。左から座標の固有状態をかけることが座標表示をとることを意味している。このように交換関係 を課すことで演算子が規定され、固有値や固有状態を定めることができる。

離散空間の次元で定義できる演算子として角運動量(angular momentum)演算子 $\hat{J} = (\hat{J}^x, \hat{J}^y, \hat{J}^z)$ (または $\hat{J} = (\hat{J}^1, \hat{J}^2, \hat{J}^3)$ と書くこともある)がある。これは次の交換関係によって規定される。

$$[\hat{J}^{\mu}, \hat{J}^{\nu}] = i\hbar \sum_{\lambda=1}^{3} \epsilon_{\mu\nu\lambda} \hat{J}^{\lambda}$$
(1.25)

 $\epsilon_{\mu
u\lambda}$ は Levi-Civita テンソルとよばれる完全反対称テンソルである。角運動量演算子の固有値と固有状態は、演算子がエルミートであることと上記の交換関係のみを用いて得ることができる。詳しくは第 1.2.2 節にまとめる。

¹²第 14 章参照。

⁹右辺は単位演算子の *i*ħ 倍を表す。

 $^{^{10}}h = 2\pi\hbar \approx 6.626 \times 10^{-34}$ J·s を Planck 定数、 \hbar を Dirac 定数ということもある。

¹¹交換しても固有値が縮退している場合には同時固有状態になるとは限らない。固有状態を適切に選べば同時固有状態にすること ができる。

時間発展

ここまでの定式化では状態や物理量の時間依存性を一切考慮していなかった。物理量の時間発展を記述 することが力学の主な目的であることを考えると、量子力学においてもやはり時間発展規則を定めなけれ ばならない。

量子力学における時間発展とは、確率分布関数 (1.14) 式が時間の関数になることである。分布関数は演算子と状態からなるので、どちらに時間依存性をいれるかは任意である。状態に時間依存性をいれて考えることが多く、Schrödinger 描像 (Schrödinger picture)とよばれる¹³。このとき、時間に依存する状態 $|\psi(t)\rangle$ はSchrödinger 方程式 (Schrödinger equation)

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle$$
 (1.26)

を満たす。H はハミルトニアン(Hamiltonian)演算子を表す。古典力学におけるハミルトニアンは座標や 運動量などを用いて運動エネルギーとポテンシャルエネルギーの和で表される。量子力学のハミルトニア ンはそれらの座標や運動量を演算子におきかえることによって得られる演算子である¹⁴。運動方程式は時 間について1階の微分方程式であるから、初期状態とハミルトニアンが与えられれば任意の時間における 状態は一意的に決まる¹⁵。これによって任意の時間における物理量の確率分布を原理的には決定すること ができる。

ハミルトニアンは古典力学においても中心的な役割を果たす量であり、これが時間に陽に依存しないときは保存するエネルギー(energy)を表す。量子力学のときも同様である。ハミルトニアンの固有値方程式を

$$\hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle \tag{1.27}$$

とする。固有値 *E_n* が保存するエネルギーを与える。このとき、状態は一般に

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{n} e^{-iE_{n}t/\hbar} |n\rangle \langle n|\psi(0)\rangle$$
(1.28)

と書くことができる¹⁶。初期状態としてエネルギーの固有状態 |n> をとれば状態の時間発展は

$$|\psi(t)\rangle = \mathrm{e}^{-iE_n t/\hbar} |n\rangle \tag{1.29}$$

のように位相が振動するだけのものとなる。このような状態を定常状態(stationary state)とよんでいる。 定常状態では物理量演算子の期待値は時間によらない。時間に依存する位相の部分は期待値をとるときに 相殺して消える。

以上のことから、量子力学的状態を理解するには基本的には

- (i) 固有値方程式を解いて各物理量がどのような値をとりうるか
- (ii) 初期状態から時間発展した状態を得る

の2点について調べればよい。(i)は量子力学特有の問題である。

1.1.2 近似手法

以上のような体系を用いて量子力学的な系が記述される。ここからは動機づけのために本講義で議論す るべき問題を概観する。

¹³演算子に時間依存性を入れる場合は **Heisenberg** 描像(Heisenberg picture)とよぶ。ただし、Schrödinger 描像でも時間に 依存する演算子を考えることがある。第4章で議論する。

¹⁴xp のような項が含まれている場合、演算子 $\hat{x} \ge \hat{p}$ は交換しないため、古典系のハミルトニアンから量子系のハミルトニアンへのおきかえは一意的ではない。そもそも $\hat{x}\hat{p}$ はエルミート演算子ではない。 $(\hat{x}\hat{p} + \hat{p}\hat{x})/2$ とすればエルミートになるし、古典系との対応がつけられることが知られている。このような並べ方を Weyl 順序 (Weyl ordering) という。

¹⁵物理量の値ではなく物理量の確率分布が一意的に決まる。

¹⁶ハミルトニアンが時間に依存するときはエネルギーは保存しない。そのような系は第4・5章で扱う。

解ける例と解けない例

まず近似法である。そもそも近似法を用いるのは厳密に解けない問題があるからである。「量子力学第 一」では調和振動子(harmonic oscillator)、「量子力学第二」では水素原子(hydrogen atom)の問題を解 いた。問題を解いたというのはそれぞれのハミルトニアンに対して固有値と固有関数を完全に決定したこ とを意味する。固有値が全て求まるととりうるエネルギーが予測できるし、固有関数が全て求まると初期 条件に応じた状態(波動関数)を表すことができる¹⁷。他に解ける問題はあるだろうか?そもそも上記の 模型を比較的簡単に解くことができた理由は何であろうか?

古典力学において問題が解けるといった場合には、時間発展の運動方程式を解けることを意味している。 量子力学の場合には、時間発展も問題であるが、それよりは固有値問題を解くことができるかという問題 に興味の中心がおかれる。固有値問題を解くことは時間発展を解くことより難しい。時間発展は時間に関 する1階の微分方程式であるから、原理的には物理量(の分布関数)の初期値を与えればそれは一意的に 時間発展していく。

調和振動子の場合、ハミルトニアンは次のように書ける。

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{p}^2 + \frac{m\omega^2}{2}\hat{x}^2 \tag{1.30}$$

これは放物線ポテンシャルに閉じ込められた粒子を表し、ばねにつながれた粒子の運動を記述する。たくさんある例のひとつにすぎないように思えるが、実のところこの模型はいたるところに出現する。特に、第 II 部で議論するが、量子多体系を記述するときにこの系から得られる性質を活用する。

時間発展の問題は容易に解ける。これは、Heisenberg 方程式 (Heisenberg equation)を調べることでわかる。

$$i\hbar \frac{\partial \hat{X}_{\rm H}(t)}{\partial t} = [\hat{X}_{\rm H}(t), \hat{H}]$$
(1.31)

 $\hat{X}_{\mathrm{H}}(t)$ は Heisenberg 描像の演算子である 18 。演算子 \hat{X} として座標・運動量演算子を考えると、運動方程 式は

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\hat{x}(t) = \frac{1}{m}\hat{p}(t) \tag{1.32}$$

$$\frac{d}{dt}\hat{p}(t) = -m\omega^2 \hat{x}(t) \tag{1.33}$$

となる。これは古典調和振動子の運動方程式と同じである。演算子に対する方程式であるが、次の古典解 と同じ表現が運動方程式を満たすことは容易に確かめられる。

$$\hat{x}(t) = \hat{x}\cos\omega t + \frac{1}{m\omega}\hat{p}\sin\omega t$$
(1.34)

$$\hat{p}(t) = -m\omega\hat{x}\sin\omega t + \hat{p}\cos\omega t \tag{1.35}$$

左辺の $\hat{x} \geq \hat{p}$ は時間 t = 0 での演算子であり、Schrödinger 描像の演算子と一致する。この表式を用いる と、与えられた初期状態に対して座標と運動量の任意の時間での期待値や分布関数を計算できる。これら の演算子を組み合わせれば、 x^2 やハミルトニアンなど他の物理量の期待値も計算できる。

なぜこのように Heisenberg の運動方程式を簡単に解くことができたのだろうか?調和振動子の場合、運動方程式は線形の方程式である。演算子が問題になるのは、異なる演算子が交換しないことによるものである。線形の方程式では演算子の積はあらわれないから、交換しないことによる量子効果が生じる余地がない。運動方程式は考えている演算子とハミルトニアンの交換関係を計算することによって得られる。運動方程式が x や p について 1 次であるのは調和振動子ハミルトニアンがそれらについて 2 次の式であることによる¹⁹。ポテンシャルが x³、x⁴ など高次のべきを含んでいる場合には運動方程式は非線形のものとな

 $^{^{17}}$ 水素原子の場合、固有関数はエネルギーが負の束縛状態のもののみ求めた。散乱状態の場合は超幾何関数を用いて表される。 18 Schrödinger 描像の演算子 \hat{X} に両側から時間発展演算子 $\hat{U}(t)$ をかける。 $\hat{X}_{H}(t) = \hat{U}^{\dagger}(t)\hat{X}\hat{U}(t)$ である。時間発展演算子につ

いては第4章を参照。

¹⁹交換関係を用いることによって次数がひとつ減る。

り解くことができなくなる。古典の場合ですら難しいのに、演算子となるとなおさら難しい。このように、 線形性が問題が解ける一つの要素であることが言える。

ただし、調和振動子の問題でもハミルトニアンは2次の式であるのでエネルギー固有値を求めることは 決して自明ではない。エネルギー固有値は次のような昇降演算子(raising/lowering operator)を用いた表 現から比較的容易に求められる。

$$\hat{H} = \left(\hat{a}^{\dagger}\hat{a} + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega \tag{1.36}$$

昇降演算子 â[†]、â は

$$\hat{a} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x} + i\sqrt{\frac{1}{2m\hbar\omega}}\hat{p}$$
(1.37)

$$\hat{a}^{\dagger} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x} - i\sqrt{\frac{1}{2m\hbar\omega}}\hat{p}$$
(1.38)

と定義される。これらの演算子は交換関係

$$[\hat{a}, \hat{a}^{\dagger}] = 1 \tag{1.39}$$

を満たす。そしてエネルギー固有値および固有関数は昇降演算子の交換関係のみを用いて求めることがで きる。詳しい導出は「量子力学第一」で詳しく行われたはずなのでここではくりかえさない。基本的な性 質や公式を次節にまとめておく。調和振動子が解くことができる数学的な理由のひとつは定数項を除いて ハミルトニアン演算子が演算子の積で書けることである²⁰。このような方法は因子化ハミルトニアンの方 法あるいは超対称性の方法などとよばれている²¹。

水素原子の場合、ハミルトニアンは

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{p}^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\frac{1}{\hat{r}}$$
(1.40)

で与えられている。静止している e の正電荷中で電荷 -e の電子が運動する模型であり、両電荷の相互作用 はそれらの距離に反比例する²²。 \hat{p} は 3 次元の運動量演算子ベクトルであり、 $\hat{r} = \sqrt{\hat{x}^2 + \hat{y}^2 + \hat{z}^2}$ は動径変 数の演算子を表す。3 次元であるから変数も増え複雑であるが、ポテンシャルが動径変数のみで書ける中心 力の系は角運動量の固有値・固有関数を用いて変数分離を行うことで 1 次元の問題に帰着させることがで きる。

水素原子ハミルトニアンは特殊な対称性をもっていることがよく知られている。次の Runge-Lenz ベクトル (Runge-Lenz vector)が保存する。

$$\hat{\boldsymbol{A}} = \frac{1}{2m} \left(\hat{\boldsymbol{p}} \times \hat{\boldsymbol{L}} + \hat{\boldsymbol{L}} \times \hat{\boldsymbol{p}} \right) - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{\hat{\boldsymbol{r}}}{\hat{\boldsymbol{r}}}$$
(1.41)

古典力学においてこのベクトルは保存し、その保存量を用いて時間発展解を表すことができる。量子力学の場合、この演算子はハミルトニアンと交換する。したがって、両演算子の同時固有状態をとることができる²³。交換関係の性質を用いてハミルトニアンの固有値・固有状態が求められるが、くわしい導出はここでは省略する²⁴。

対称性が存在する系では保存量があるという事実は多くの系で広く知られた事実であるし、一般論も展開されている。実際、Runge-Lenzベクトルほど難しい例でなくても、中心力の系における角運動量など、これまでに扱われてきた例でも対称性は積極的に活用されている。未知の系、特に多自由度の系では対称性を手がかりにして模型を組み立てることも多い。

 $^{{}^{20}\}hat{H} - \text{const.} = \hat{A}^{\dagger}\hat{A}$ のように書けること。

²¹さらに形状不変性とよばれる性質をもつ例でもある。この性質は水素原子のハミルトニアンで動径変数の部分を考えたときにもあらわれる。問題 [1-6] 参照。

²²本来は正電荷の部分の運動(重心運動)も考える必要があるが省略する。第7章で簡単に扱う。

²³Runge-Lenz ベクトルの各成分同士は交換しない。

²⁴量子力学第二演習問題で出題した。「足立ドリル」にもある。後者はかなり詳しくまとめてあるためおすすめ。

非線形な系

複雑なポテンシャルをもった系では固有値・固有状態を求めることは不可能となる²⁵。そのような場合、 運動方程式は非線形になるし固有値方程式も解くことができない。よく扱われる例が次のハミルトニアン である。

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{p}^2 + \frac{m\omega^2}{2}\hat{x}^2 + \lambda\hat{x}^4$$
(1.42)

これは非調和振動子(anharmonic oscillator)の代表的な例として非線形効果を調べるためによく用いられる。偶関数の範囲で調和振動子の次に簡単なポテンシャルであるからという理由が大きいが、さまざまな解析の中であらわれる模型である²⁶。近似法のベンチマーク問題としてもよくとりあげられる。

非線形な系ではふつう問題を厳密に解くことができない。そもそも古典系ですら難しい問題である²⁷。古 典系の場合、時間発展は微分方程式を数値的に解くなどして答えを得ることができるが、量子力学の場合 はエネルギーなどの物理量がどのような値をとりうるかを求めないといけないから問題はより複雑である。 上の例で $\lambda > 0$ の場合にはポテンシャルの形状が調和振動子から大きく変わるわけではなく、束縛状態が とびとびのエネルギーの値をもって存在することが予想される。ところが、谷が複数生じたり、散乱状態 が生じるなど複雑になってくると問題は手に負えなくなってくる。

そのようなときに各種の近似法の役割が生じる。近似法は、摂動展開、変分法、平均場近似、半古典近 似などの汎用的な手法および模型に依存した特別の手法など多くのものが用いられている。近似のなかで も摂動展開(perturbative expansion)の方法は非常に系統的・汎用的なものであり、さかんに用いられて いる。これはわかっている系からハミルトニアンが少しずれたとき、ずれをべき展開で求める方法である。 関数の Taylor 展開の方法のようなものである。エネルギーなどの物理量をパラメータのべき展開を用いて 表す。べき展開の項数を増やせば精度をあげていくこともできる²⁸。

摂動展開は非常に汎用的な手法であるが、展開の各項を計算しないといけない。精度をあげようと思ったらたくさんの高次項が必要となるが、一般に計算の手間は高次項になればなるほど増す。問題によっては摂動展開より変分法(variational method)の方が精度のいい結果を出すことがある。これは系統性は摂動展開よりも悪いが、使い方によっては計算精度を非常に高くすることができる方法である。本講義では近似の中でも代表的なこれらの手法を主に扱う。

これらの近似法は非常に便利なものであるが、そもそも問題を解くことが目的であれば計算機を用いれ ばよい。計算機が高度に発達した現代では計算機にのせれば多少複雑な系でも精度のよい解を簡単に求め てくれる。紙とペンを使ってがんばって解く必要があるのだろうか?

多自由度の系

非線形な系を解くことが難しいことを述べたが、1自由度の系であればポテンシャルが複雑になってもお およそのことであれば性質を理解することは難しくない。真に難しい問題は多自由度の系を解くときに生 じる。

3次元調和振動子の系を考えてみよう。

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{p}^2 + \frac{m\omega^2}{2}\hat{r}^2$$
(1.43)

この場合の問題は自由度が3に増えたにもかかわらず容易に解くことができる。なぜなら変数分離されて いるからである。ハミルトニアンは $\hat{H} = H(\hat{x}, \hat{p}_x) + H(\hat{y}, \hat{p}_y) + H(\hat{z}, \hat{p}_z)$ のように各変数のハミルトニアンの和にすることができる。このとき、波動関数は $\psi(\mathbf{r}) = \psi_x(x)\psi_y(y)\psi_z(z)$ のようにそれぞれの変数の関

²⁵閉じた形で求めることができないということである。次章で行う計算ではべき展開で解を表す。各項を求めることは原理的には可能であるが、無限の項を全て計算することは現実的ではない。

 $^{^{26}}$ 同形のハミルトニアンは多体系の場の理論でもあらわれ、Ising 模型の相転移を記述する。その模型では $\omega^2 < 0$ となる場合もある。

²⁷そのような系でも無限個の保存量が存在して解ける模型がある。さまざまなものが知られており、非線形可積分系として一大分 野を形成している。

²⁸ただし、物理における展開は漸近展開であることが多い。漸近展開とは収束半径が0の展開である。

数の積で表され、それぞれの変数の問題を別々に解けばよいことになる²⁹。問題は変数分離されていない ハミルトニアンを扱うときに生じる。例えばポテンシャルに âŷのような項が含まれているとき、ハミルト ニアンは独立な和に分解されていない。そのようなとき、波動関数が各変数の関数の積で表されるという 仮定をおいても方程式は解けない。

ただし、それですぐにあきらめてはいけない。適当な変数変換を行うことによって変数分離できること がある。問題 [1-4] でその例を扱う。中心力の系における極座標変換もそのような例である。ポテンシャル が動径変数にしかよらない場合、角度方向の方程式はポテンシャルに関係なく解くことができる。動径方 向の方程式は中心力ポテンシャルに遠心力ポテンシャルが加わった1次元の問題を解くことになる。この ように、難しさがみかけだけのこともある。解ける系というのはほとんどの場合このような変数変換を行っ て変数分離を行うことができる系である。問題に応じてうまい変数変換を見つけることは問題を解くこと とほぼ同義である。中心力をもつ回転対称な系では極座標を用いるのが定石であるように、適当な座標の 選択は系のもつ対称性とも密接に関係している。

また、多自由度の系においてはエネルギー準位に縮退が生じやすいという問題も生じる。例えば2自由 度の調和振動子で変数分離ができる系でも問題 [1-4] で扱うように縮退が生じる。エネルギーの縮退が生じ ると、あるエネルギー準位を与える状態が一意的でなくなる。例えば、エネルギー準位 E_n を与える独立 な状態が $|n,\mu\rangle$ ($\mu = 1, 2, \dots, d$) であるとき、縮退度は d であるという³⁰。このような系ではそれらの縮 退した状態の任意の線形結合がエネルギー固有状態を与える。一般にそれらは他の演算子を用いて区別で きる。区別できなかったら状態としては完全に同じものであるからである。したがって、問題に応じて他 の演算子の固有関数になるように固有状態を選ぶことが多い³¹。エネルギー固有状態さえ求めればよいわ けではない。他の適当な演算子の固有状態を考えたとき、得られる解は変数分離された解の適当な和にな るので全体としては変数分離できないものとなる。ハミルトニアンが(和に)変数分離されているからと いって波動関数まで(積に)変数分離されているとは限らない。

ハミルトニアンが座標と運動量の演算子で書かれている場合を考えてきたが、スピンのような他の演算 子を考えることもある。粒子がスピンとよばれる内部自由度をもっている場合、ハミルトニアンは一般に スピンにも依存する。この場合でもハミルトニアンが変数分離されていれば問題は簡単であるが一般には 分離できない。

多自由度の問題は多体系でも実現する。上記のハミルトニアンは1粒子の系を想定していたが、世の中 の多くの問題は多体問題である。多体問題では複数の粒子の運動を問題にする。2粒子の系のハミルトニ アンは、たとえば

$$\hat{H} = \frac{1}{2m_1}\hat{p}_1^2 + \frac{1}{2m_2}\hat{p}_2^2 + U_1(\hat{r}_1) + U_2(\hat{r}_2) + V(|\hat{r}_1 - \hat{r}_2|)$$
(1.44)

のように複雑になる。各項の意味は第7章で議論するが、 $V(|\hat{r}_1 - \hat{r}_2|)$ の相互作用ポテンシャルがあると き、一般に変数分離を行うことは難しい。

変数が増えて複雑になるといっても2次元にするのと2粒子にするのでは問題は変わらないように思え るが、同種粒子多体系の場合には、粒子の非識別性を考慮する必要がある。「熱・統計力学第二」で扱った が、粒子が同種粒子の場合、それらの粒子は区別がつかない。そしてその原理はさまざまな量子効果をも たらす。粒子が区別がつかないことにより、状態には特別の対称性が課される。とりうる状態のパターン が制限されるといってもよい。多自由度の系では状態の数も増えるから、その中から対称性を満たす状態 をうまく選ぶ必要がある。

いずれにしろ、多体系では変数も増えるので問題を解くのは困難になる。そのような場合、近似を用い て系の性質を理解することは自然な発想である。問題に応じて適切な近似を用いることは、系の性質を捉 えることにもつながる。問題にもよるが、数値計算でただ精度よく数値を出してもその系を理解すること に直ちにつながるわけではない。したがって、相補的になるさまざまな手法を確立させておくことは無駄 なことではない。

²⁹変数分離については「量子力学第二」で詳しく扱ったはずであるが、第7章でも扱う。

³⁰縮退がないときは縮退度1 である。0 ではない。ときどき間違えるひとがいる。 ³¹他の事情で特定の線形結合を選ぶこともある。それが多体系の場合である。

1.1.3 多体系

前節でも議論したが、多体系の問題を考える意義についてさらに考察をすすめる。

自由度の数

多体系の問題は自由度が増えることにある。議論をわかりやすくするため、スピン(spin)の系を考え よう。「熱・統計力学第二」で扱った Ising 模型のようなものを考えてもらえばよい³²。スピン演算子は3 次元のベクトル Ŝ で表される。演算子が満たす交換関係は角運動量のもの (1.25) 式と同じである。スピン がひとつしかない系であれば典型的なハミルトニアンは

$$\hat{H} = \boldsymbol{h} \cdot \hat{\boldsymbol{S}} \tag{1.45}$$

のようなものである。ベクトルhは演算子ではなく磁場などの外部パラメータを表す。スピン量子数が 1/2 の系ではこれがもっとも一般的な演算子である³³。

式 (1.68) で指定されるスピン量子数 j が決まった値をとる系では、考える Hilbert 空間の次元は 2j + 1 となる³⁴。例えば j = 1/2 のとき、系は 2 次元であり、演算子は 2×2 の行列で表すことができる。このく らいの行列であれば問題を解くこと、つまり行列を対角化することはそれほど難しくない。問題は粒子の数 (スピンの数)が増えた場合である。多体スピン系の典型的なハミルトニアンは

$$\hat{H} = \sum_{i,j=1}^{N} J_{ij} \hat{\boldsymbol{S}}_i \cdot \hat{\boldsymbol{S}}_j + \sum_{i=1}^{N} \boldsymbol{h}_i \cdot \hat{\boldsymbol{S}}_i$$
(1.46)

のようなものである。スピン演算子の添字は各スピンを表す指標である。異なる指標をもつ演算子は互い に交換する。これは Heisenberg 模型とよばれ、磁性体の性質を理解するために用いられる模型である。第 1項がなければハミルトニアンは各スピンの演算子の和に分解できるからやはり変数分離することができ る。第1項は2種類のスピンを含んだ相互作用を表しておりこれが問題を解くことを難しくする。

何よりも問題なのは自由度の増え方である。N 粒子の系において考えるべき Hilbert 空間の次元、つま り行列の大きさは各スピンが j = 1/2 の場合 2^N となる³⁵。これは N を大きくするとたちまち巨大な数と なる。N = 10 の場合 $2^N = 1024$ 、N = 20 となると $2^N = 1048576$ である。20 くらいまでの系であれば手 持ちのパソコンでなんとか数値的に解く(対角化を行う)ことができるが、それ以上となるとまともに解 くことは不可能となる。統計力学では熱力学極限(thermodynamic limit) $N \to \infty$ でのふるまいを問題に する。特に、相転移の現象は熱力学極限をとってはじめて発現する。計算機で扱うことは不可能である。

多体系の量子力学の難しさのひとつは考える空間が莫大な数になることにある。ただし、多体系でも粒 子数を無限大にしたときに問題が解けるようになる例がある。これは大きい系のもつ特徴的な性質であり、 数学的には大数の法則によってその特徴が保証されている。そこが統計力学の面白いところでもある。た だし、無限大にすれば何でも解けるかというとそうでもない。ある種の特別な例を除いて多体系を解くこ とは非常に難しく、これは物理学のあらゆる分野における深刻な問題としていまだに物理学者を悩ませて (楽しませて)いる。したがって、そのような系で何らかの近似法を用いて問題を解くことはきわめて現実 的かつ本質的な選択なのである。実際に、そのようにして多くの問題が「理解」されている。

場の量子力学

同種粒子の系では粒子の区別がつかない。「熱・統計力学第二」で考えたように、そのような系を考える にはまず粒子が区別つくとして計算を行っておいて、それから区別がつかないことをとりいれる。詳しく

³²なぜハミルトニアンがスピン演算子だけで表されるのかは第 II 部、特に第 10 章を参照。

 $^{^{-33}}$ 式(1.68)でj=1/2の場合。j>1/2の系では $(\hat{S}^x)^2$ のような非線形項も存在しうるので問題が少し難しくなる。

 $^{^{34}}$ スピン演算子 \hat{S} で書かれた任意のハミルトニアンは j の値毎にブロック対角化されるのでそれぞれを独立に考えることができる。通常、粒子のもつスピンは特定の j となるので、その場合は 2j+1 の空間のみを考えればよい。

 $^{^{35}1}$ つのスピンについて 2 通りの状態があり、それが N 個あるので 2^N 。

は第7章で行うが、区別がつかないことは波動関数の対称化・反対称化によってなされる。これは正しい 手続きであるが、無駄な作業とも思える。区別ができないのであればはじめから区別がつかないように記 述するべきであるし、そのような記述の仕方があるのではないか。

実のところ、このことは既に「熱・統計力学第二」においてとりいれられている。カノニカル分布で自 由粒子の問題などを解くとき、ふつうに計算を行っておいてから粒子が区別がつかないのだからという説 明で分配関数を N! で割る。得られる自由エネルギーが正しい示量性をもつためという説明もなされるが、 いずれにしてもそれでは低温でエントロピーが負になるなど正しいふるまいを導かない。そこで、粒子 1 がエネルギー準位 ϵ 、粒子 2 がエネルギー準位 ϵ' に入る、というように考えるのではなく、準位 ϵ に入る粒 子は n 個、準位 ϵ' に入る粒子は n' 個、…とする。粒子が区別できないのであればこの方が自然な考え方で ある。そしてそれは低温でも熱力学的に自然な結果を導く。粒子は Bose 粒子と Fermi 粒子に大別される。

「熱・統計力学第二」では自由粒子の系のみを扱っていた。自由粒子の場合、ハミルトニアンは変数分離 されているから各粒子がとりうる1粒子準位を得ることができる。そして、そこに粒子が何個入るかを考 える。このような描像は自由粒子に特別の場合である。相互作用している系では1粒子状態という概念自 体が意味をもつかどうかわからない。変数分離できない場合、各粒子のもつエネルギーは定義できないし 波動関数も各粒子毎に分解できない。そこで、1粒子エネルギーの代わりに空間座標の点rにある粒子は どれくらいかを考える。量子力学では波動関数は空間中にひろがっている場合がほとんどであるので、そ のような場合も記述できるように密度でとらえる。そうすれば相互作用の有無によらず一般的に定式化で きる。自由粒子で1粒子状態に粒子を「入れる」ことを考えたように点rに粒子をつくる演算子を定義す る。それが場(field)という演算子である。

ー般に、場とは空間座標の各点において定義されている量である。例えば、天気予報を考えたときに、温度は各点におけるスカラー場を表すし、風の強さと向きはベクトル場である。量子力学的な場の量は $\psi(r)$ のように空間座標の関数(演算子)として表される。粒子を区別できるとしたら、N粒子系の状態は3N個の変数をもった波動関数 $\psi(r_1, \ldots, r_N)$ で表されなければならない。これは3Nという高次元空間における量を考えていることになる。このような量はもちろん現実的な意味をもたない。粒子が区別がつかなければN 個の変数を区別する必要もないから、 $\psi(r)$ で十分である。これで各空間座標の点に粒子が「どれくらい」いるかを表すことができる。場の量子論をつくるには粒子の区別がつかないとすることが必須なのである。

場の量は波動関数とよく似たものであるが、全く異なるものである。波動関数は量子力学的粒子の波と しての性質を捉えたものである。量子力学をはじめて学ぶときに、粒子と波の二重性ということが言及さ れ、二重スリットの実験がもちだされる。ところが、これまで扱われてきた系において粒子性というのは ほとんど強調されることがない。多くの問題では粒子はひとつであってそれが増えも減りもせず空間に波 としてひろがっていると考えてきたのである。場の量は粒子を作ったり消したりする過程を記述すること ができる。素粒子の理論ではそのような粒子の生成・消滅が頻繁に起こるし、素粒子でなくても複数の粒 子が複合粒子を形成するなどの現象が生じる。明らかにこれまでの量子力学の知識だけではそのような現 象を記述することができない。場の量子論は波と粒子の2 重性を表現する方法となる。

量子力学と電磁気学

場の量を用いた古典系の理論は既に扱われている。電磁気の理論である。電磁気学は電磁場(electromagnetic field)を記述する体系である。空間の各点に電磁場とよばれるものが定義されており、その時間発展 は Maxwell 方程式で記述される。荷電粒子をおくとその点における電磁場によって力が働く。そのような 理論において電磁場は光の速さで伝搬する波であり実在するものである。

電磁場の系のラグランジアンは場の量の積分を用いて表される。電場 E(r,t) と磁場 B(r,t) を用いて

$$L = \int d^3 \boldsymbol{r} \left(\frac{\epsilon_0}{2} \boldsymbol{E}^2(\boldsymbol{r}, t) - \frac{1}{2\mu_0} \boldsymbol{B}^2(\boldsymbol{r}, t) \right)$$
(1.47)

と書ける。電磁場が座標と時間の局所的な関数であるのでラグランジアンは空間座標の積分で表される³⁶。

ラグランジアンが定義されればハミルトニアンも Legendre 変換によって得られる。荷電粒子がないときの 運動方程式は、電磁場をゲージポテンシャルで表しそれについて変分原理を適用することによって得られ る。それが Maxwell 方程式である。

一方、荷電粒子がある系では電磁場と荷電粒子の相互作用を考えなければならない。古典力学において、 荷電粒子の運動は次のラグランジアンによって記述される。

$$L = \frac{m}{2}\dot{\boldsymbol{r}}^2(t) - q\phi(\boldsymbol{r}(t), t) + q\dot{\boldsymbol{r}}(t) \cdot \boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}(t), t)$$
(1.48)

q は電荷量、 φ および A はゲージポテンシャルを表す。二つのラグランジアンを比べてみると記述の仕方 が異なることがわかるだろう。電磁場の場合、場の量が変数として用いられている。その場合、空間座標 r はただの積分変数にすぎない。電磁場の有無に関わらず任意の点においてラグランジアン密度が定義さ れ、その座標積分がラグランジアンを表す。一方、荷電粒子の場合は r は時間の関数であり荷電粒子の位 置を記述する力学変数である。電磁場と荷電粒子の系をまとめて記述するためには記述方法を同じにしな ければならない。また、電磁場の理論やラグランジアンを用いた記述は古典系のものであるから量子化を 行う必要もある。

荷電粒子が時空間上に外場として分布していると考える場合には電磁場のラグランジアンは

$$L = \int d^3 \boldsymbol{r} \left(\frac{\epsilon_0}{2} \boldsymbol{E}^2(\boldsymbol{r}, t) - \frac{1}{2\mu_0} \boldsymbol{B}^2(\boldsymbol{r}, t) - \rho(\boldsymbol{r}, t)\phi(\boldsymbol{r}, t) + \boldsymbol{j}(\boldsymbol{r}, t) \cdot \boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}, t) \right)$$
(1.49)

と書くことができる。 $\rho(\mathbf{r},t)$ は電荷密度、 $\mathbf{j}(\mathbf{r},t)$ は電流密度を表す。このように荷電粒子の寄与は場の量として表現できる。したがって場の量を用いた量子力学の記述法はこの表現を古典極限でもたらすようなものでなければならない。

このように考えると当然起こる疑問が、座標演算子の扱いである。場の量で量子力学を表現すると、座 標は演算子ではなくただの積分変数に格下げにならざるをえない。量子力学によって導入された座標演算 子はどうなるのだろうか。この点についても明らかにする必要がある。

量子力学を場の形式を用いて表現することができれば電磁場を量子化する道もひらけることになる。古 典系のラグランジアンが与えられたとき、それをどのようにすれば量子化されるかがわかればよい。粒子場 の量子化にならって電磁場の量子化を行うことができる。電磁場の量子化は本講義の範囲外であるが、量 子電磁力学は物理学でもっとも成功した理論のひとつであり、驚異的に精密な値を予言することが可能に なっている³⁷。

1.1.4 再び:量子力学の原理

改めて問いかけるが、量子力学の本質とは何だろうか。量子力学の不思議な性質をいくつか挙げてみると

- 物理量のとりうる値を確率でしか予言できない
- 演算子の非可換性より物理量は同時に確定した値をとれない
- 状態の重ねあわせ
- 同種粒子が区別できない
- 測定が状態を変化させる

となる。量子力学は古典力学と記述方法が根本的に異なるので、何が本質であるかつかみにくい。量子力 学はHilbert 空間という特殊な空間を考え、その性質に基づいて理論が構築されている。なぜそのようなも のが必要なのだろうか。もっとわかりやすい原理を用いて定式化を行うことはできないのだろうか。例え ば、相対論は光速度不変という原理(および古典力学の原理)から全ての性質が導かれていた。Hilbert 空 間など抽象的な理論ではなくて物理原理にのっとった定式化を行うべきではないかと考えるのは自然であ

³⁷36 ページの脚注参照。

る。量子力学を物理原理に基づいた法則として導くことは大きな課題として残されており、研究が進められている。

もちろん、最初に述べた通り現象を説明することが物理学の使命であるとすれば、理論がどう構成され ようが大した問題ではない。気持ち悪さは残るかもしれないが、現在のところ量子力学が間違っていると いう積極的な理由はどこにもないし困ることは何もない。ただ、現在の定式化において量子力学の本質が どこにあるのかを正確に理解しておくと、将来量子力学の原理を組み立て直すときが来た時に役に立つは ずである。記述法の不思議さに惑わされてしまって注意が向かないが、量子力学が古典力学と決定的に異 なる点はどこにあるのだろう。量子力学がいかに不思議でも、同様の性質を古典物理学(非量子力学)を 用いて説明できるのであれば、量子力学は必要ないのではないか。

量子力学の記述が不完全であることを主張したのは Einstein-Podolsky-Rosen である(1935年)。これ は EPR パラドックス(EPR paradox)として知られている有名な思考実験である。Einstein が量子力学 を終生認めなかったのはよく知られているが、量子力学がいかに奇妙であるか本質をついた例を持ちだして 量子力学が不完全であるということを主張したのである。EPR の論文を受けて Bohr は同年すぐさま反論 する論文を発表したし、Schrödinger も触発された論文を書いている。Schrödinger の論文で用いられたエ ンタングルメント(entanglement) 量子もつれ(quantum entanglement)という語は、現在では量子力 学を象徴するキーワードとなっている。また、有名な Schrödinger の猫 (Schrödinger's cat)のパラドッ クスもその論文で提示されている³⁸。

果たしてどちらが正しいのだろうか。Einstein らは量子力学が間違っているとは主張しておらず、不完 全であると述べている。量子力学が奇妙に見えるのは何か見落としているものがあり、古典物理学の範囲 で全ての現象を説明することができるはずだと Einstein らは考えていたのだろう。ところが、実際には物 事はそのようには運ばなかったのである。これが第 III 部で理解するべき問題である。

量子力学が古典物理学と根本的に異なるのであれば、古典物理学でできないことを用いて新しい技術を 生みだすことができるのではないかと考えるのは自然な発想である。技術の進歩により微細な系を作成・ 制御できるようになった現代では量子力学に基づいたさまざまな技術が開発・利用されている。その中で も量子力学の原理に基づいて計算機を作成しようとする試みは注目すべきである。量子計算機をつくるこ とができれば現在ある計算機をはるかに上回る性能が期待されている。その理由がどこにあるのかを理解 することは、量子力学の本質を理解することにつながる。

最後に、測定の問題についてとりあげたい。量子力学の講義・演習では多くの時間が固有値問題を解くこ とに費やされている。もちろんそれも重要なことであるが、観測にともなう状態の変化という性質はこれ まで軽く説明されてきただけで十分な議論がなされていない。観測という視点は古典力学では自明なもの として扱われていた。そこで量子力学において観測・測定とは何を意味するのか真剣に検討すべきである。 量子力学を学ぶときにまず言及されるのが不確定性原理である。最初の節で述べたように、これの正確な 定義は議論の余地があり、現在でも研究が行われている。いわゆる Heisenberg の不確定性関係はその意味 がややあいまいである。どのような状況のもとでそれが成り立つかを理解するためには測定とは何かを十 分よく理解する必要がある。基本原理として量子力学の講義のはじめの方で扱われる性質であるが、量子 力学の性質をひと通り見てきた後でその意味を検討し直してみる意義はあるだろう³⁹。

1.2 まとめ

本節ではこれまでに扱ってきた例の中でも重要な三つの例の性質をまとめる。前節でも少し扱ったが、次 章以降でも頻繁に用いるのであらためて公式としてまとめておく。

³⁸Schrödinger は量子力学の建設に大きな役割を果たしているが、一方で量子力学の解釈(Bohr による Copenhagen 解釈)については批判的であった。

³⁹本講義では状態の収縮とは何かというような「観測」の問題は扱わない。状態の収縮を認めたうえで「測定」の問題について議論する。

1.2.1 調和振動子

調和振動子のハミルトニアンは

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{p}^2 + \frac{m\omega^2}{2}\hat{x}^2$$
(1.50)

で与えられる。昇降演算子を

$$\hat{a} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x} + i\sqrt{\frac{1}{2m\hbar\omega}}\hat{p}$$
(1.51)

$$\hat{a}^{\dagger} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x} - i\sqrt{\frac{1}{2m\hbar\omega}}\hat{p}$$
(1.52)

と定義すると、ハミルトニアンは

$$\hat{H} = \left(\hat{a}^{\dagger}\hat{a} + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega \tag{1.53}$$

と書ける。昇降演算子は交換関係

$$[\hat{a}, \hat{a}^{\dagger}] = 1$$
 (1.54)

を満たす。

ハミルトニアンの固有値・固有状態は次のように書ける。

$$\hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle \tag{1.55}$$

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega\tag{1.56}$$

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (\hat{a}^{\dagger})^n |0\rangle \tag{1.57}$$

nは非負の整数を表す。n = 0が基底状態であり、n = 1が第一励起状態、n = 2が第二励起状態、...と続く。基底状態は

$$\hat{a}|0\rangle = 0 \tag{1.58}$$

によって定義される。基底状態が定義されれば励起状態は â[†] をかけることによって下から順番に作ってい くことができる。また、上の定義で固有状態は正規直交性

$$\langle m|n\rangle = \delta_{m,n} \tag{1.59}$$

を満たす。

座標と運動量演算子は昇降演算子を用いて

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\hat{a} + \hat{a}^{\dagger}) \tag{1.60}$$

$$\hat{p} = -i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}(\hat{a} - \hat{a}^{\dagger}) \tag{1.61}$$

と書けるから、全ての計算を昇降演算子を用いて行うことができる。昇降演算子をエネルギー固有状態に かけると

$$\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle \tag{1.62}$$

$$\hat{a}^{\dagger}|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle \tag{1.63}$$

となる。これらの関係を用いることで任意の物理量の計算を行うことができる。

波動関数を求めるには左から座標の固有状態をかければよい。基底状態の場合(1.58)式に左から座標の 固有状態をかけると、運動量演算子 \hat{p} は微分演算子 $-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$ におきかえられ 1 階の微分方程式が得られる。 それを解いて規格化すると

$$\langle x|0\rangle = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right)$$
 (1.64)

を得る。励起状態の波動関数はエルミート多項式と Gauss 関数の積で

$$\langle x|n\rangle = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \sqrt{\frac{1}{2^n n!}} \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right) H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\right)$$
(1.65)

$$H_n(z) = e^{z^2} \left(-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}z}\right)^n e^{-z^2}$$
(1.66)

と表される。

調和振動子のエネルギー固有値や固有状態の性質は全て(1.54)式の交換関係のみを用いて導かれる40。 昇降演算子の具体的な表現は波動関数を求めるときにのみ用いられる。昇降演算子がエネルギーをひとつ ずつ上げたり下げたりするという性質は、後に Bose 粒子の生成消滅を記述するために転用される。

1.2.2 角運動量とスピン

スピンを含む一般化角運動量演算子 $\hat{J} = (\hat{J}^x, \hat{J}^y, \hat{J}^z)$ または $\hat{J} = (\hat{J}^1, \hat{J}^2, \hat{J}^3)$ は次の交換関係を満たす エルミート演算子である⁴¹。

$$[\hat{J}^{\mu}, \hat{J}^{\nu}] = i\hbar \sum_{\lambda=1}^{3} \epsilon_{\mu\nu\lambda} \hat{J}^{\lambda}$$
(1.67)

 $\epsilon_{\mu\nu\lambda}$ はLevi-Civita テンソル (Levi-Civita tensor)とよばれる完全反対称テンソルである 42 。 $\epsilon_{123}=1$ と して後はとなり同士の添字を入れかえる毎に符号を変えるという規則で定義される。したがって、添字の どれか二つが一致している成分は0である。 $\epsilon_{123} = \epsilon_{231} = \epsilon_{312} = 1$ 、 $\epsilon_{132} = \epsilon_{213} = \epsilon_{321} = -1$ で残りは0 となる。

固有値と固有状態は演算子がエルミートであることと上記の交換関係のみによって決めることができる。 ベクトル演算子の各成分は互いに交換しないが、 $\hat{J}^2 = (\hat{J}^x)^2 + (\hat{J}^y)^2 + (\hat{J}^z)^2$ とは交換するため、 \hat{J}^2 と例 えば \hat{J}^z の同時固有状態を考えることができて

$$\hat{J}^2|j,m\rangle = j(j+1)\hbar^2|j,m\rangle \tag{1.68}$$

$$\hat{J}^{z}|j,m\rangle = m\hbar|j,m\rangle \tag{1.69}$$

を得る。ここで j は非負の半整数を表す。つまり、 $0, 1/2, 1, 3/2, \dots$ の値をとる。j が一つ与えられたと き、mの取りうる値は $-j, -j+1, -j+2, \ldots, j-1, j$ の2j+1通りである。 \hat{J}^2 の固有値が $j^2\hbar^2$ でなく $i(i+1)\hbar^2$ となるのは量子効果のあらわれである(問題 [1-1])。

iが整数のとき、この演算子は軌道角運動量演算子 $\hat{L}=\hat{r} imes\hat{p}$ と等価である 43 。半整数のiも含む角運 動量演算子はスピンの自由度を表す。自転している粒子にたとえられることもあるが、基本的には古典的 対応物をもたない量である。スピン自由度は相対論的共変性をもった Dirac 方程式を考えることによって 導かれるが、でどころを問わなければ通常の量子力学の体系によって記述することができる。

 $^{^{40}}$ エネルギーに下限があるという条件を用いると $\hat{a}^{\dagger}|0'
angle=0$ となる状態 |0'
angle からエネルギーをひとつずつ下げていくという状態 系列は排除される。

 $^{^{41}}$ 数字を上付きの添字にするとべき乗に見えるので注意。 $\hat{J}^2=(\hat{J}^x)^2+(\hat{J}^y)^2+(\hat{J}^z)^2$ はよく用いるが、 $(\hat{J})^2$ の意味での \hat{J}^2 は ありえないので見分けることはそれほど難しくないはずである。

 $^{^{42}}$ Levi-Civita は一人の名前である。なお、 $\epsilon_{\mu\nu\lambda}$ は Eddington のイプシロンとよぶこともあるが日本のみにおいてらしい。 43 軌道角運動量演算子の場合、座標表示を行うことによって整数の j のみが許されることが示される。

軌道角運動量の場合には座標表示である球面調和関数 (spherical harmonics)を得ることができる。球面調和関数は角運動量 \hat{L}^2 と \hat{L}^z の固有状態であり

$$\boldsymbol{L}^{2}Y_{\ell,m}(\boldsymbol{\theta},\boldsymbol{\varphi}) = \ell(\ell+1)\hbar^{2}Y_{\ell,m}(\boldsymbol{\theta},\boldsymbol{\varphi})$$
(1.70)

$$L^{z}Y_{\ell,m}(\theta,\varphi) = m\hbar Y_{\ell,m}(\theta,\varphi)$$
(1.71)

を満たす。 $L = r \times (-i\hbar \nabla)$ であり、 θ 、 φ は極座標を用いたときの角度変数を表す。また、 ℓ は非負の 整数、 $m = -\ell, -\ell + 1, \dots, \ell$ である。球面調和関数は $P_{\ell}^m(\cos \theta) e^{im\varphi}$ に比例している。 $P_{\ell}^m(z) = (1 - z^2)^{m/2} \left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}z}\right)^m P_{\ell}(z) = \frac{1}{2^{\ell}\ell!} (1 - z^2)^{m/2} \left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}z}\right)^{\ell+m} (z^2 - 1)^{\ell}$ は Legendre 陪多項式を表す。

j = 1/2の場合はもっとも簡単なスピンを表し、本講義でも頻繁に用いる。この場合 Hilbert 空間の次元 は 2 であり、演算子を行列で表して計算すると便利なことが多い。 \hat{J} の代わりに \hat{S} の記号をよく用いるの でそう表す。

$$\hat{\boldsymbol{S}} = \frac{\hbar}{2}\hat{\boldsymbol{\sigma}} \tag{1.72}$$

によって Pauli 演算子 (Pauli operator) $\hat{\sigma}$ を定義すると、その行列表示である Pauli 行列 (Pauli matrix) は次のように書ける。

$$\hat{\sigma}^x = \begin{pmatrix} 0 & 1\\ 1 & 0 \end{pmatrix} \tag{1.73}$$

$$\hat{\sigma}^y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \tag{1.74}$$

$$\hat{\sigma}^z = \begin{pmatrix} 1 & 0\\ 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{1.75}$$

ただし、基底を $|j = 1/2, m = 1/2\rangle$ 、 $|j = 1/2, m = -1/2\rangle$ のようにとった。これらの基底は $|+\rangle$ 、 $|-\rangle$ や $|\uparrow\rangle$ 、 $|\downarrow\rangle$ と表すこともある。本講義 ノートの第 III 部ではある理由のため、 $|0\rangle$ 、 $|1\rangle$ と表す⁴⁴。

Pauli 行列は次のような性質を満たす。

(i)
$$[\hat{\sigma}^{\mu}, \hat{\sigma}^{\nu}] = 2i \sum_{\lambda=1}^{3} \epsilon_{\mu\nu\lambda} \hat{\sigma}^{\lambda}$$

9

(ii)
$$\{\hat{\sigma}^{\mu}, \hat{\sigma}^{\nu}\} = 2\delta_{\mu,\nu}\hat{I}_2$$
 ($\{A, B\} = AB + BA$)

(iii)
$$\operatorname{Tr} \hat{\sigma}^{\mu} \hat{\sigma}^{\nu} = 2\delta_{\mu,\nu}$$

(iv)
$$(\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \boldsymbol{A}) (\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \boldsymbol{B}) = (\boldsymbol{A} \cdot \boldsymbol{B}) \hat{I}_2 + i \hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot (\boldsymbol{A} \times \boldsymbol{B})$$
 (A、B は任意のベクトル)

(v)
$$f(\theta \hat{\sigma} \cdot n) = \frac{f(\theta) + f(-\theta)}{2} \hat{I}_2 + \frac{f(\theta) - f(-\theta)}{2} \hat{\sigma} \cdot n$$
 (f(θ) は関数、n は単位ベクトル)

 \hat{I}_2 は単位行列を表す。Pauli 行列は、2 乗すると単位演算子になり、異なる成分とは反交換する(符号を変える)ことを覚えておくと便利である。

1.2.3 水素原子

距離に反比例するポテンシャルの系は水素原子を記述する。

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{p}^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\frac{1}{\hat{r}}$$
(1.76)

 $\hat{r}=\sqrt{\hat{x}^2+\hat{y}^2+\hat{z}^2}$ である。これは原子核が静止しているとしたときに電子の運動を記述するハミルトニアンとなる 45 。

 $^{^{44}}$ その際、 $\ket{+}$ 、 $\ket{-}$ は $\hat{\sigma}^x$ の固有状態を表すために用いられる。

⁴⁵一般には原子核と電子のハミルトニアンを書き下して重心運動と相対運動を分離する。後者がここで考えるハミルトニアンとなる。以前に扱ったはずである。第7章でも扱う。

極座標表示を用いて固有値方程式を表すと

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{L^2}{2mr^2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\frac{1}{r}\right]\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r})$$
(1.77)

である。 $L = r \times (-i\hbar \nabla)$ は角運動量演算子(の座標表示)を表す。この演算子は角度座標 θ 、 φ にのみ依存して動径座標rにはよらない。波動関数を

$$\psi(\mathbf{r}) = R_{n,\ell}(r)Y_{\ell,m}(\theta,\varphi) \tag{1.78}$$

と分離すると角度部分は球面調和関数で表される⁴⁶。動径座標の部分は

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2} + \frac{2}{r}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\right) + \frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2mr^2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\frac{1}{r}\right]R_{n,\ell}(r) = E_n R_{n,\ell}(r)$$
(1.79)

である。固有関数は主量子数 n および角運動量の量子数 l によって特徴づけられ

$$R_{n,\ell}(r) = \left\{ \left(\frac{2}{na_{\rm B}}\right)^3 \frac{(n-\ell-1)!}{2n[(n+\ell)!]^3} \right\}^{1/2} \rho_n^{\ell} \mathrm{e}^{-\rho_n/2} L_{n-\ell-1}^{2\ell+1}(\rho_n)$$
(1.80)

と書ける。ここで

$$\rho_n = \frac{2}{na_{\rm B}}r\tag{1.81}$$

とおいた。 a_B は Bohr 半径 (Bohr radius) を表す。

$$\frac{1}{a_{\rm B}} = \frac{m}{\hbar^2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \tag{1.82}$$

また、 $L_q^p(z) = \left(-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}z}\right)^p L_{q+p}(z)$ は Laguerre 多項式 $L_q(z) = \mathrm{e}^z \left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}z}\right)^q (z^q \mathrm{e}^{-z})$ から定義される Laguerre 陪 多項式である。

nは自然数の値をとり、 ℓ は

$$\ell = 0, 1, 2, \dots, n-1 \tag{1.83}$$

の値をとる。n = 1、 $\ell = 0$ が基底状態を表し、nを上げていくと固有エネルギーも上がっていく。固有エネルギーは

$$E_n = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{2n^2 a_{\rm B}} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{n^2 a_{\rm B}^2}$$
(1.84)

と書ける。固有エネルギーは ℓ 、mによらないからその分だけ縮退している。各準位の縮退度は $\sum_{\ell=0}^{n-1} (2\ell+1) = n^2$ である⁴⁷。

水素原子のエネルギーおよび固有関数は Bohr 半径 $a_{\rm B} \approx 0.529 \times 10^{-10} \, {\rm m}$ によって特徴づけられる。これは Planck 定数を含む定数であるから量子性によるものである。水素原子のだいたいの大きさもこの大き さによって決まる。

以上で得られた固有状態はいずれも束縛状態を表すものである。そのため、エネルギーは負の値をとる。 正のエネルギー状態は連続的に存在し散乱状態となる。散乱状態の固有関数も得ることができるが、やや 複雑であるし以下の章でも用いないのでここではとりあげない⁴⁸。

1.3 構成

「はじめに」でも述べたが、本講義および講義ノートは三つの部からなる。本章のはじめの節でそれぞ れの内容について問題や意義を述べた。内容は以下の表の通りとなる。

^{4&}lt;sup>6</sup>角運動量の項は全ての変数を含むのでハミルトニアンは変数分離されているとはいえないが、変数分離でこのように解ける場合 もある。この場合、動径変数の方程式は角度変数に関する量子数ℓに依存する。

⁴⁷電子はスピン 1/2 の自由度をもっているのでその分も考慮すると縮退度は 2 倍される。

⁴⁸完全性を表すには散乱状態も必要となる。ただし、無限遠点で0になる関数であれば束縛状態のみを用いて表すことができる。

章	題名	内容
1	概論	講義の目的や概要、方針
第Ⅰ部	近似法	
2	定常状態の摂動論 (1)	縮退のないときの摂動
3	定常状態の摂動論 (2)	縮退のあるときの摂動
4	時間に依存する系の摂動論	時間依存摂動の定式化と応用
5	時間に依存する系	時間に依存する簡単な系、断熱近似等
6	变分法	变分原理、応用、平均場近似
第 II 部	多体系	
7	同種粒子	Fermi 粒子と Bose 粒子、波動関数の対称性
8	場の演算子と量子化	場の演算子、場の量子化
9	多体系の量子力学: 電子系	多体電子系、相互作用の効果
10	多体系の量子力学: 磁性	強結合模型、磁性、交換相互作用
第 III 部	量子力学の原理をめぐって	
11	密度演算子	純粋状態・混合状態の密度演算子、Bloch ベクトル
12	量子もつれと Bell の不等式	量子もつれ、EPR パラドックス、Bell の不等式
13	量子計算	量子回路、量子テレポーテーション
14	量子測定	射影測定、間接測定、不確定性関係

表 1.1:構成と各章の内容

各章と講義の回は対応している。1回の講義で1章分の内容を扱うつもりである。節のタイトルに*が ついている節は、やや発展的な内容なのではじめて読む場合にはとばしてもかまわない。とばしても以降 の内容を理解できるようにしてあるはずである。なお、講義は講義ノート通りではない可能性があること を注意しておく。講義と講義ノートは別物である。

また、どの章にも問題を最後にいれてある。問題は [A]、 [B]、 [C] に分類されている。

- [A] 講義ノートの内容に沿った問題。説明でとばした計算を確認させる簡単なものが多いが、やや難しい ものもまざっている。講義中に解くかもしれない。
- [B] 標準的なレベルの問題。これくらいの問題をできるようになるのが目標である。骨のある問題も多いので、すぐわからなくてもあきらめないで根気よく考えてほしい。クラスBの演習ではこの問題を解いて発表してもらう。
- [C] 発展的な問題。難しいというよりは専門的・特殊な話題が多い。

なお、第1章の問題はやや難しめで手間のかかる内容にしてあるので完璧にできなくても気にしなくてよい。くじけないで次にいってほしい。答えは配布しないので各自で解いてほしい(演習受講者にも配布しない)。もちろん、質問はいつでも歓迎する。

1.4 参考書

以下に参考書を挙げる。いずれも講義ノート作成の参考にしたものである。ただし、本講義の内容を全 てカバーする教科書は存在しない。第I部の摂動論はほとんどの標準的な教科書で扱われているが、時間 依存系の問題は多くの教科書で摂動を用いた扱いのみにとどまっている。第II部については、同種粒子の 扱いは多いが、場の理論までふみこんで議論を行うものは多くはない。後者についてはより高度な場の量 子論の教科書を参照した方がよいだろう。第III部の内容を扱っている手頃な教科書は少ない。

- 1. 猪木 慶治 川合 光 「量子力学 II」 講談社 1994 年 標準的な教科書。摂動論と同種粒子・場の演算子の記述あり。
- 2. 砂川 重信 「量子力学」 岩波書店 1991 年 標準的な教科書。摂動論と同種粒子・場の演算子の記述あり。
- 3. 小出 昭一郎 「量子力学 II」 裳華房 1990 年(改訂版) 上記二つより易しめの教科書。摂動論と同種粒子・場の演算子の記述あり。
- 4. J. J. Sakurai, "Modern Quantum Mechanics" 1994 年 (revised ed.) 有名な教科書。日本語訳もある。摂動論と同種粒子の記述あり。
- 5. A. Messiah, "Quantum Mechanics" Dover 2014 年 (reprint) オリジナルは 60 年代に出版されている。古典的教科書。摂動論と同種粒子の記述あり。日本語訳も ある。
- 6. R. Shankar, "Principles of Quantum Mechanics" Springer 1994年 (2nd ed.) 標準的な教科書。摂動論と同種粒子の記述あり。
- K. Konishi and G. Paffuti, "Quantum Mechanics A New Introduction" Oxford UP 2009 年 何でも載っている辞書みたいな教科書。個々のテーマについてはあまり詳しくはない。
- A. Altland and B. Simons, "Condensed Matter Field Theory" Cambridge UP 2010 年 (2nd ed.) 場の演算子やその物性論への応用。内容は大学院講義「多体系の量子力学」に相当する。本講義で扱うのは第2章まで。第3章からは経路積分を用いている。
- 9. 藪 博之「多粒子系の量子論」 裳華房 2016 年 場の演算子やその応用。基本的な考え方や平均場近似などの基本的な計算法を扱っている。
- 10. 清水 明 「量子論の基礎」 サイエンス社 2004 年 量子力学の原理がわかる教科書。量子もつれや Bell の不等式について詳しい。
- M. A. Nielsen and I. L. Chuang, "Quantum Computation and Quantum Information" Cambridge UP 2000 年 量子計算・量子情報分野における標準的な教科書。700ページある。第 III 部に関してはこれさえあ れば全て事足りる。日本語訳(オーム社)もあるが在庫切れとなっている。
- 12. 石坂 智 小川 朋宏 河内 亮周 木村 元 林 正人 「量子情報科学入門」 共立出版 2012 年 日本語で書かれた量子情報理論関連の教科書の中ではかなり詳しくまとまって書かれている。量子情 報科学という書名の通り、量子力学というよりは数学・情報理論的な記述が多い。やや難しめ。
- 13. 中原 幹夫 「量子物理学のための線形代数」 培風館 2016 年 量子系を扱うために必要な線形代数のまとめ。後半は量子情報・計算の問題について扱っている。
- 14. 沙川 貴大 上田 正仁 「量子測定と量子制御」 サイエンス社 2016 年 量子測定について詳しい。

基本的に本講義ノートで全て事足りるようにしているつもりではあるが、他の教科書を用いて勉強した いというのであれば1または2がよいだろう。どれも難しすぎてつらいというひとには3がよい。英語を 読む意欲があれば6をおすすめする。あまりあれこれ見ると気が散るので講義が終わってから興味のある 本を読むなどしてほしい。

1.5 問題

 $[\mathbf{A}]$

[1-1] 演算子の交換関係と不確定性

任意のエルミート演算子 \hat{A} 、 \hat{B} に対して交換関係

$$[\hat{A}, \hat{B}] = i\hat{C} \tag{1-1.1}$$

を考える。また、これらの演算子が作用する状態ベクトルを $|\psi\rangle$ とする。

(a). 演算子 \hat{C} はエルミートであることを示せ。

(b). tを任意の実数として、 $\hat{X} = t\hat{A} + i\hat{B}$ という演算子を考える。 $\hat{X}|\psi\rangle$ のノルムが非負であることを用いて、次の式を示せ。

$$\langle \psi | \hat{A}^2 | \psi \rangle \langle \psi | \hat{B}^2 | \psi \rangle \ge \frac{1}{4} \left(\langle \psi | \hat{C} | \psi \rangle \right)^2 \tag{1-1.2}$$

(c). (b) の結果を用いて (1.22) 式の不確定性関係を示せ。

(d).式(1.25)によって規定される角運動量演算子を考える。固有状態として次のようなものを考える。

$$\hat{J}^2|j,m\rangle = j(j+1)\hbar^2|j,m\rangle \tag{1-1.3}$$

$$\hat{J}^{z}|j,m\rangle = m\hbar|j,m\rangle \tag{1-1.4}$$

j、m は適当な実数を表す。整数であるという性質はここでは用いない。このとき、(b)の性質を用いて $j \ge |m|$ である ($j \ge |m|$ とすることができる) ことを示せ。

[1-2] スピンと回転

スピン 1/2 (j = 1/2)の演算子 \hat{S} について考える。

(a). 単位ベクトル $n = (\sin \theta \cos \varphi, \sin \theta \sin \varphi, \cos \theta)$ 方向の演算子 $\hat{S} \cdot n$ の固有状態

$$\hat{\boldsymbol{S}} \cdot \boldsymbol{n} |\pm \boldsymbol{n} \rangle = \pm \frac{\hbar}{2} |\pm \boldsymbol{n} \rangle$$
 (1-2.1)

を考える。行列表現を対角化することにより正規直交化された固有状態を求め、 \hat{S}^z の固有状態 $|\pm
angle$ を用いて表せ。

(b).

$$|+\boldsymbol{n}\rangle = \hat{U}(\theta,\varphi) |+\rangle$$
 (1-2.2)

$$-\boldsymbol{n}\rangle = U(\theta,\varphi) \left|-\right\rangle$$
 (1-2.3)

と書いたとき、ユニタリー演算子 \hat{U} の行列表現を求めよ。また、次のように定義されるベクトル関数 $A(\theta, \varphi)$ を求めよ。

$$\hat{U}(\theta,\varphi) = \exp\left(-\frac{i}{2}\boldsymbol{A}(\theta,\varphi)\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}\right)$$
(1-2.4)

(c). $|+n\rangle$ の状態に対して \hat{S} の各成分をそれぞれ測定したとき、取りうる値とその値が実現する確率を求めよ。

[1-3] 調和振動子

1次元調和振動子の系において次のようなコヒーレント状態を考える。

$$\hat{a}|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle \tag{1-3.1}$$

âは(1.37)式の下降演算子を表す。

(a). 固有値方程式 (1–3.1) は任意の複素数 α に対して解くことができる。 $|\alpha\rangle$ をエネルギー固有状態 $|n\rangle$ (n = 0, 1, 2, ...)の線形結合を用いて表せ。また、

$$|\alpha\rangle = \mathrm{e}^X|0\rangle \tag{1-3.2}$$

と書いたときの演算子 \hat{X} を求めよ。 $|0\rangle$ は基底状態を表す。 $\langle \alpha | \alpha \rangle = 1$ とする。

(b). コヒーレント状態の座標表示

$$\phi_{\alpha}(x) = \langle x | \alpha \rangle \tag{1-3.3}$$

および時間発展状態の座標表示

$$\phi_{\alpha}(x,t) = \langle x | \mathrm{e}^{-i\hat{H}t/\hbar} | \alpha \rangle \tag{1-3.4}$$

を求め、 $|\phi_{\alpha}(x,t)|^2$ を図示せよ。

(c). コヒーレント状態の完全性

$$\int \frac{\mathrm{d}^2 \alpha}{\pi} \left| \alpha \right\rangle \langle \alpha | = 1 \tag{1-3.5}$$

を示せ。積分は α の実部と虚部についてそれぞれ $-\infty$ から ∞ まで行う。

(d). 次の式を示せ。

$$\langle x|\mathrm{e}^{-i\hat{H}t/\hbar}|x'\rangle = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i\hbar\sin(\omega t)}} \exp\left\{\frac{im\omega}{2\hbar\sin(\omega t)}\left[(x^2 + x'^2)\cos(\omega t) - 2xx'\right]\right\}$$
(1-3.6)

|x> は座標の固有状態を表す。

[1-4] 多自由度の調和振動子

2次元調和振動子系を考える。

$$\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2 \tag{1-4.1}$$

$$\hat{H}_i = \frac{1}{2m}\hat{p}_i^2 + \frac{m\omega_i^2}{2}\hat{x}_i^2 \quad (i = 1, 2)$$
(1-4.2)

(a). $\omega_1 = \omega_2$ のとき、各固有値の縮退度(同じ固有値を与える独立な固有状態の数)を求めよ。縮退が 全く存在しないためには $\omega_1 \ge \omega_2$ をどのようにとればよいか。

以下 $\omega_1 = \omega_2 = \omega$ とする。

(b). 基底状態の波動関数 $\psi_0(x_1, x_2)$ を求めよ。

(c). 次の波動関数はどのような状態を表すか。

$$\psi_1(x_1, x_2) = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} (x_1 + x_2) \psi_0(x_1, x_2)$$
(1-4.3)

また、同じエネルギーをもつ独立な状態の波動関数を求めよ。

(d). (b) と (c) の状態 $\psi_0(x_1, x_2)$ 、 $\psi_1(x_1, x_2)$ について、粒子の座標 1 が x_1 と観測される確率密度 $\rho(x_1)$ と、座標 2 が x_2 である条件の元で座標 1 が x_1 となる条件つき確率密度 $\rho(x_1|x_2)$ をそれぞれ求めよ。

(e). \hat{H} 、 \hat{H}_1 、 \hat{H}_2 を測定できるとする。このとき次の期待値が得られた。

$$\langle \hat{H}^k \rangle = (3\hbar\omega)^k \qquad (k = 1, 2, ...)$$
 (1-4.4)

$$\langle \hat{H}_1 \rangle = \langle \hat{H}_2 \rangle = \frac{3}{2} \hbar \omega \tag{1-4.5}$$

$$\langle \hat{H}_1^2 \rangle = \langle \hat{H}_2^2 \rangle = \frac{11}{4} (\hbar \omega)^2 \tag{1-4.6}$$

考えられる系の波動関数を書き下せ。

(f). ハミルトニアンを次のように変更したとき、エネルギー固有値を求めよ。

$$\ddot{H} \to \ddot{H} + m\omega^2 \delta \hat{x}_1 \hat{x}_2$$
 (1-4.7)

 δ は $-1 < \delta < 1$ の定数とする。

[1-5] 超対称性

次の関係を満たすエルミート演算子 \hat{H} 、 \hat{Q} 、 \hat{P} を考える。 \hat{H} はハミルトニアンである。

$$\hat{H} = \hat{Q}^2 \tag{1-5.1}$$

$$\hat{P}\hat{Q} = -\hat{Q}\hat{P} \tag{1-5.2}$$

$$\hat{P}^2 = 1 \tag{1-5.3}$$

(a). 以下の性質を示せ。

- (i) [Ĥ, Q̂] = 0
 (ii) [Ĥ, P̂] = 0
 (iii) エネルギー固有値 E_n は非負の量: E_n ≥ 0
- (iv) *P*の固有値は ±1

(b). \hat{H} と \hat{P} は交換するので同時固有状態をとることができる。次の規格化された固有状態 $|n,+\rangle$ があるとする。

$$\hat{H}|n,+\rangle = E_n|n,+\rangle \tag{1-5.4}$$

$$\hat{P}|n,+\rangle = |n,+\rangle \tag{1-5.5}$$

 $E_n > 0$ のとき、状態 $\hat{Q}|n,+
angle$ がどのような性質をもつか調べよ。 $E_n = 0$ のときはどうか。

以下、 \hat{Q} を次のようにおく。

$$\hat{Q} = \begin{pmatrix} 0 & \hat{A}^{\dagger} \\ \hat{A} & 0 \end{pmatrix} \tag{1-5.6}$$

$$\hat{A} = \frac{1}{\sqrt{2m}} \left(\hat{p} - iW(\hat{x}) \right)$$
(1-5.7)

W(x) は実関数である。

(c). 演算子 \hat{P} およびハミルトニアン \hat{H} を求めよ。

(d). W(x) = cxのとき、(b)等で考察した一般論がどのように実現されているかを調べよ。cは正の定数を表す。

(e). ゼロエネルギー固有値をもつ基底状態が存在するとしたとき、基底状態の波動関数をW(x)を用いて表せ。

(f). 次の波動関数で与えられるゼロエネルギーの基底状態が存在したとする。

$$\psi(x) = \frac{b}{\cosh(ax)} \tag{1-5.8}$$

a、b は正の定数を表す。対応する W(x)、 \hat{H} を求めよ。

 $[\mathbf{C}]$

[1-6] 水素原子

1次元半無限空間(x>0)の系において次の演算子を定義する。

$$\hat{A}_{\ell} = \frac{1}{\sqrt{2m}} \left[\hat{p} - i \left(\frac{mk}{\hbar(\ell+1)} - \frac{\hbar(\ell+1)}{\hat{x}} \right) \right] \qquad (\ell = 0, 1, 2, \ldots)$$
(1-6.1)

*m、k*は正の定数を表す。

(a). $\hat{H}_{\ell}^{(\pm)}$ を次のように定義する。

$$\hat{H}_{\ell}^{(+)} = \hat{A}_{\ell}^{\dagger} \hat{A}_{\ell} \tag{1-6.2}$$

$$\hat{H}_{\ell}^{(-)} = \hat{A}_{\ell} \hat{A}_{\ell}^{\dagger} \tag{1-6.3}$$

両者の関係を調べよ。

$$(\mathrm{b}).$$
次の式から定義される波動関数 $\psi_\ell^{(+)}(x) = \langle x | \psi_\ell^{(+)}
angle$ を求めよ。

$$\hat{A}_{\ell} | \psi_{\ell}^{(+)} \rangle = 0$$
 (1-6.4)

また、 $|\psi_\ell^{(+)}
angle$ が $\hat{H}_\ell^{(+)}$ の基底状態であることを示せ。

(c). $\hat{H}_{\ell}^{(-)}$ の基底状態および固有値を求めよ。

(d). $\hat{H}_{\ell}^{(-)}$ の基底状態を $|\psi_{\ell}^{(-)}
angle$ としたとき、次の状態を定義する。

$$|\tilde{\psi}_{\ell}^{(-)}\rangle = \hat{A}_{\ell}^{\dagger}|\psi_{\ell}^{(-)}\rangle \tag{1-6.5}$$

これは何を表しているか。

(e). 与えられた角運動量量子数 ℓのもとで、水素原子系の問題を解く。上記の解析よりエネルギー固有 値および動径変数の波動関数が得られることを示せ。

第Ⅰ部

近似法

第2章 定常状態の摂動論(1)

定常状態における摂動論(perturbation theory)、摂動展開の方法を扱う。わかっている解から少しだけ ハミルトニアンがずれたとき、そのずれを系統的に解析する方法である。固有値や固有状態を微小パラメー タのべき展開で表す。摂動によって得られる補正項は多くの場合直観的な解釈が可能であり、物理的な描 像を得るための手段となることもある。たかが近似と思わないでほしい。

2.1 問題設定

これまでに扱ってきた系は、井戸型ポテンシャルや調和振動子、水素原子等、解析的に固有値方程式を 解くことができるものが主であった。現実にはそのような系はまれであり、ほとんどの問題は厳密に解く ことができない。何らかの近似を用いて固有値方程式を解く必要がある。そのような近似手法のひとつが 摂動論である。摂動という語および手法は、古典力学における惑星の運動などを記述するために考えられ たものである。摂という語はとりこむ、自らのものにするという意味をもつ。対応する英語の perturb は かき乱すという意味であり、捉え方が異なるのは興味深い。

ハミルトニアンが2つの演算子の和で表される問題を考える。

$$\hat{H}(\lambda) = \hat{H}_0 + \lambda \hat{V} \tag{2.1}$$

 λ は無次元の実数パラメータを表す。 $\hat{H}(0) = \hat{H}_0$ の状態の性質、つまり固有値と固有状態が完全にわかっているとする。このとき $\lambda \neq 0$ の系について何かわかることはないだろうか。もし、 $|\lambda| \ll 1$ であれば $\hat{H}(0)$ の系と大きな違いはないと期待できる。そのとき、固有値・固有状態は λ のべき展開として表される。これが摂動の基本的な考え方である。 \hat{H}_0 を無摂動ハミルトニアン、 \hat{V} を摂動ハミルトニアンとよぶことにする¹。 λ は計算をわかりやすくするために入れているが、小さいパラメータが \hat{V} の中に入っていると考えることもできる。演算子 \hat{V} がいくつ入っているかでその項の次数を判断できる。摂動近似がよい条件を単純に考えると $|\lambda| \ll 1$ であるが、実際には摂動項や考えている状態に強く依存した複雑なものとなる²。このことは、公式を導出後に詳しく議論する。

考えられる問題設定は以下のようなものである。

- (i) 定常束縛状態のエネルギー固有値と固有状態を決定する問題。それぞれが λ のべき展開を用いて表される。次節で縮退のない簡単な場合を扱い、次章で縮退のある場合も扱えるように拡張する。
- (ii)時間に依存する摂動を印加する問題。典型的な問題設定は、無摂動ハミルトニアンの固有状態にあった状態が摂動によってどれだけ他の固有状態(無摂動ハミルトニアンのもの)に遷移したかを時間の 関数として求めることである。制御可能な外場を摂動項として扱い、系の応答がどのようなものになるかについて調べることができる。第4章で扱う。
- (iii) (定常)散乱状態を決定する問題。エネルギー E と初期入射状態は与えられているので、問題は散 乱状態を求めることになる。散乱問題で扱った散乱方程式(Lippmann-Schwinger 方程式)を用いる と散乱状態を摂動的に求めることができる。そこで扱った Born 近似は摂動の1次近似である。問題 [4-4]で同様の結果を導く。

¹無摂動(unperturbed)とよく似た非摂動(nonperturbative)という語も存在するが、後者は(\hat{V} も含めた系を)摂動近似を 超えて厳密またはそれに近い方法で扱うという意味で用いられることが多い。非摂動をここでの無摂動の意味で用いているひともと きどき見かける。

²計算する量を $X(\lambda) = X_0 + \lambda X_1 + \cdots$ としたとき、 $|\lambda|$ がいくら小さくても $|X_1/X_0|$ が非常に大きくなってしまうことがある。そのようなとき、摂動近似は実用上役に立たない。

摂動近似では計算する量 *X*(λ) をべき展開で表す。ところが、次のような関数は摂動展開の方法を用いて解析できない。

$$X(\lambda) = \exp\left(-\frac{1}{\lambda}\right) \tag{2.2}$$

X(0) = 0 であるが、 $\lambda \neq 0$ の寄与はべき展開では表現できない。べき展開しようとすると各べきの係数は 0 となってしまう。また、次節で述べるが、 λ をいれた途端状態の性質が全く変わってしまうものは扱うこ とができない。ということで摂動展開は決して万能な方法ではない。このような問題を扱うには何らかの 非摂動的な手法を用いる必要がある。

また、摂動項が無摂動項と交換する場合には、以下で議論する近似を用いる必要はない。二つの項の同時固有状態をとりさえすればよい³。交換しないと同時対角化できないため、以下で導く公式を用いて近似解を求めることが行われる。

2.2 束縛状態における摂動論: 縮退のないとき

2.2.1 摂動展開

問題設定(i)の場合である定常束縛状態について考えよう。目標は固有値方程式

$$\hat{H}(\lambda)|n(\lambda)\rangle = E_n(\lambda)|n(\lambda)\rangle$$
(2.3)

を解くことである。無摂動ハミルトニアンに対する固有値方程式を

$$\hat{H}_0|n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)}|n^{(0)}\rangle \qquad n = 0, 1, 2, \dots$$
(2.4)

とする。n は各固有状態を区別するラベルである。全ての固有値・固有状態を既知のものとしたときに、 (2.3) 式の解を近似的に求める。エネルギー固有値を

$$E_n(\lambda) = E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \cdots$$
(2.5)

と書く。このべき展開における最初のいくつかの項を求める。

このようにエネルギー固有値を書くということは、 $\lim_{\lambda\to 0} E_n(\lambda) = E_n^{(0)}$ であることを意味する。つま り、 $E_n(\lambda) \ge E_n^{(0)}$ には1対1の対応がある。エネルギー準位は連続的につながっていることを想定してい る。また、摂動によって縮退が生じることもない。図 2.1(a)のような縮退が生じない連続変形を考えてい る。(b)は縮退が生じる場合だが、このとき縮退が生じる点で2つの準位の区別がつかなくなってしまうこ とにより解析的な扱いができなくなる。ただし、両者を区別することができるのであればよい。つまり、他 によい量子数があってそれによって状態が区別されればよい⁴。縮退が生じるということは、対称性のよう な系の基本的な性質を反映していることが多い。そのような例や、(c)のように縮退がある系で摂動によっ て縮退が解ける状況は次章で扱う。とりあえずここでは (a)の場合を想定している。

解を求めるためにはエネルギー固有状態も同時に展開を行う必要がある。次のようにおくのが自然だろう。

$$|n(\lambda)\rangle = |n^{(0)}\rangle + \lambda |n^{(1)}\rangle + \lambda^2 |n^{(2)}\rangle + \cdots$$
(2.6)

式(2.3)に代入し、入の各べきを比較することで各項を求める式が得られる。次のようになる。

1
$$\mathcal{K}: \hat{H}_0|n^{(1)}\rangle + \hat{V}|n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)}|n^{(1)}\rangle + E_n^{(1)}|n^{(0)}\rangle$$
(2.7)

$$2 \ \mathcal{K}: \ \hat{H}_0|n^{(2)}\rangle + \hat{V}|n^{(1)}\rangle = E_n^{(0)}|n^{(2)}\rangle + E_n^{(1)}|n^{(1)}\rangle + E_n^{(2)}|n^{(0)}\rangle$$
(2.8)

³その場合、例えばエネルギーは $E_{n,m}(\lambda) = E_n + \lambda V_m$ のように二つの独立な量子数で特徴づけられ、 λ の1 次関数となる。状態は λ に依存しない。

⁴このときハミルトニアンはブロック対角化されており、二つの縮退した準位は異なるブロックに属している。


図 2.1: エネルギー準位の λ 依存性。ここでは (a) のような縮退が生じない場合を想定している。(b) のように縮退が生じる場合は扱うことができない。ただし、例外もある。本文を参照。(c) は縮退している準位が摂動によって解ける場合。次章で扱う。

一般には k を自然数として

$$k \ \mathcal{K}: \ \ \hat{H}_0|n^{(k)}\rangle + \hat{V}|n^{(k-1)}\rangle = E_n^{(0)}|n^{(k)}\rangle + E_n^{(1)}|n^{(k-1)}\rangle + \dots + E_n^{(k)}|n^{(0)}\rangle$$
(2.9)

と書ける。0次は(2.4)式となる。

これらの式を変形することでエネルギー固有値・固有状態の補正項を求める。無摂動ハミルトニアンの 固有状態が正規直交化されているとする。

$$\langle m^{(0)} | n^{(0)} \rangle = \delta_{m,n}$$
 (2.10)

また、以下で用いるが、固有状態は完全性を満たす。

$$\sum_{n} |n^{(0)}\rangle \langle n^{(0)}| = 1$$
(2.11)

このとき、1 次の項 (2.7) 式に左から $\langle m^{(0)} |$ をかけて

$$E_m^{(0)}\langle m^{(0)}|n^{(1)}\rangle + \langle m^{(0)}|\hat{V}|n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)}\langle m^{(0)}|n^{(1)}\rangle + E_n^{(1)}\delta_{m,n}$$
(2.12)

となる。m = nとおくことでエネルギー固有値の1次補正を得る。

$$E_n^{(1)} = \langle n^{(0)} | \hat{V} | n^{(0)} \rangle \tag{2.13}$$

一方、 $m \neq n$ のときは

$$\langle m^{(0)} | \hat{V} | n^{(0)} \rangle = (E_n^{(0)} - E_m^{(0)}) \langle m^{(0)} | n^{(1)} \rangle$$
(2.14)

である。無摂動ハミルトニアンのエネルギー固有値に縮退がない、つまり $E_n^{(0)}
eq E_m^{(0)}$ とすると、

$$\langle m^{(0)} | n^{(1)} \rangle = \frac{\langle m^{(0)} | \hat{V} | n^{(0)} \rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \tag{2.15}$$

を得る。状態の 1 次補正 $|n^{(1)}\rangle$ が $|m^{(0)}\rangle$ をどれだけ含んでいるかを表している。 $|n^{(1)}\rangle$ を完全性を用いて 展開すると

$$|n^{(1)}\rangle = \sum_{m} |m^{(0)}\rangle \langle m^{(0)}|n^{(1)}\rangle = |n^{(0)}\rangle \langle n^{(0)}|n^{(1)}\rangle + \sum_{m(\neq n)} |m^{(0)}\rangle \frac{\langle m^{(0)}|\dot{V}|n^{(0)}\rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}$$
(2.16)

となる。 $\langle n^{(0)} | n^{(1)} \rangle$ は未定であることに注意。これは上の計算だけからでは求まらない。他の条件を考える必要がある。このことは次節で考えることにして、先に 2 次の項を見てみる。

$$\langle m^{(0)} | \hat{H}_0 | n^{(2)} \rangle + \langle m^{(0)} | \hat{V} | n^{(1)} \rangle = E_n^{(0)} \langle m^{(0)} | n^{(2)} \rangle + E_n^{(1)} \langle m^{(0)} | n^{(1)} \rangle + E_n^{(2)} \delta_{m,n}$$
(2.17)

m = n とおくとエネルギー固有値の2次の補正項が

$$E_n^{(2)} = \langle n^{(0)} | \hat{V} | n^{(1)} \rangle - E_n^{(1)} \langle n^{(0)} | n^{(1)} \rangle$$
(2.18a)

$$= \left(\langle n^{(0)} | \hat{V} | n^{(0)} \rangle - E_n^{(1)} \right) \langle n^{(0)} | n^{(1)} \rangle + \sum_{m (\neq n)} \frac{\langle n^{(0)} | V | m^{(0)} \rangle \langle m^{(0)} | V | n^{(0)} \rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}$$
(2.18b)

$$= \sum_{m(\neq n)} \frac{\langle n^{(0)} | \hat{V} | m^{(0)} \rangle \langle m^{(0)} | \hat{V} | n^{(0)} \rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}$$
(2.18c)

と書ける。 $m \neq n$ では

$$\langle m^{(0)} | \hat{V} | n^{(1)} \rangle = (E_n^{(0)} - E_m^{(0)}) \langle m^{(0)} | n^{(2)} \rangle + E_n^{(1)} \langle m^{(0)} | n^{(1)} \rangle$$
(2.19)

より、

$$\langle m^{(0)} | n^{(2)} \rangle = \frac{\langle m^{(0)} | \hat{V} | n^{(1)} \rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} - \frac{E_n^{(1)}}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \langle m^{(0)} | n^{(1)} \rangle$$

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

$$(2.20a)$$

$$(E_{\hat{n}} - E_{\hat{m}})^2$$
(2.20b)

となる。式 (2.16) と同様にして $|n^{(2)}\rangle$ の表式を得る。やはり $\langle n^{(0)}|n^{(2)}\rangle$ は未定となる。 以上のようにしてエネルギー固有値を 2 次まで求めることができた。

$$E_n^{(1)} = \langle n^{(0)} | \hat{V} | n^{(0)} \rangle \tag{2.21}$$

$$E_n^{(2)} = \sum_{m(\neq n)} \frac{\langle n^{(0)} | \hat{V} | m^{(0)} \rangle \langle m^{(0)} | \hat{V} | n^{(0)} \rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}$$
(2.22)

導出の際に用いた仮定は、考えている準位 n の固有値に縮退がないことである。他の状態に縮退があって もよい。また、考えている状態は束縛状態であるが、他の状態に散乱状態が存在しても問題は生じないこ とも注意しておく。その場合、状態についての和は積分におきかえられる。

エネルギー固有値は固有状態の未定部分には依存しない。その理由は今のところ不明であるが、さしあたって未定部分を決める必要がある。固有状態は正規直交条件を満たす必要があるが、これはまだ考えていない。規格化条件を課して得られる関係を調べる⁵。 $\langle n(\lambda)|n(\lambda) \rangle = 1$ から、

$$1 = 1 + \lambda \left(\langle n^{(0)} | n^{(1)} \rangle + \langle n^{(1)} | n^{(0)} \rangle \right) + \lambda^2 \left(\langle n^{(0)} | n^{(2)} \rangle + \langle n^{(2)} | n^{(0)} \rangle + \langle n^{(1)} | n^{(1)} \rangle \right) + \cdots$$
(2.23)

と書ける。 λ の各べきの係数から条件式が得られる。1 次の項は

$$\langle n^{(0)} | n^{(1)} \rangle + \langle n^{(1)} | n^{(0)} \rangle = 0$$
(2.24)

である。つまり、 $\langle n^{(0)} | n^{(1)}
angle$ は純虚数であり

$$\langle n^{(0)}|n^{(1)}\rangle = i\theta_n^{(1)} \tag{2.25}$$

を得る。 $\theta_n^{(1)}$ は実定数を表す。これより状態の1次補正は次のようになる。

$$|n^{(1)}\rangle = \sum_{m} |m^{(0)}\rangle \langle m^{(0)}|n^{(1)}\rangle = i\theta_{n}^{(1)}|n^{(0)}\rangle + \sum_{m(\neq n)} |m^{(0)}\rangle \frac{\langle m^{(0)}|\hat{V}|n^{(0)}\rangle}{E_{n}^{(0)} - E_{m}^{(0)}}$$
(2.26)

2次の場合は

$$\frac{\langle n^{(0)} | n^{(2)} \rangle + \langle n^{(2)} | n^{(0)} \rangle + \langle n^{(1)} | n^{(1)} \rangle = 0$$
(2.27)

⁵直交条件は問題 [2-2] で調べる。

より、やはり実定数 $\theta_n^{(2)}$ を用いて

$$\langle n^{(0)} | n^{(2)} \rangle = i\theta_n^{(2)} - \frac{1}{2} \langle n^{(1)} | n^{(1)} \rangle$$
 (2.28)

と書ける。第2項は

$$\langle n^{(1)}|n^{(1)}\rangle = \theta_n^{(1)2} + \sum_{m(\neq n)} \frac{\langle n^{(0)}|\hat{V}|m^{(0)}\rangle\langle m^{(0)}|\hat{V}|n^{(0)}\rangle}{(E_n^{(0)} - E_m^{(0)})^2}$$
(2.29)

と計算される。

以上をまとめると λ の 2 次までで

$$\begin{aligned} |n(\lambda)\rangle &\sim \left(1 + i\lambda\theta_n^{(1)} + i\lambda^2\theta_n^{(2)} - \frac{\lambda^2}{2}\theta_n^{(1)2} - \frac{\lambda^2}{2}\sum_{m(\neq n)} \frac{\langle n^{(0)}|\hat{V}|m^{(0)}\rangle\langle m^{(0)}|\hat{V}|n^{(0)}\rangle}{(E_n^{(0)} - E_m^{(0)})^2}\right) |n^{(0)}\rangle \\ &+ \sum_{m(\neq n)} |m^{(0)}\rangle \left[\lambda\frac{\langle m^{(0)}|\hat{V}|n^{(0)}\rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} + \lambda^2\sum_{\ell(\neq n)} \frac{\langle m^{(0)}|\hat{V}|\ell^{(0)}\rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \frac{\langle \ell^{(0)}|\hat{V}|n^{(0)}\rangle}{E_n^{(0)} - E_\ell^{(0)}} - \lambda^2\frac{\langle m^{(0)}|\hat{V}|n^{(0)}\rangle\langle n^{(0)}|\hat{V}|n^{(0)}\rangle}{(E_n^{(0)} - E_m^{(0)})^2}\right] \end{aligned}$$
(2.30)

と書ける。未定定数が残っていることが気になるが、この表現をよく見てみると次のように書けることが わかる⁶。

$$\begin{aligned} |n(\lambda)\rangle &\sim \exp\left(i\lambda\theta_{n}^{(1)}+i\lambda^{2}\theta_{n}^{(2)}-\frac{\lambda^{2}}{2}\sum_{m(\neq n)}\frac{\langle n^{(0)}|\hat{V}|m^{(0)}\rangle\langle m^{(0)}|\hat{V}|n^{(0)}\rangle}{(E_{n}^{(0)}-E_{m}^{(0)})^{2}}\right) \\ &\times \left[|n^{(0)}\rangle+\sum_{m(\neq n)}|m^{(0)}\rangle\left(\lambda\frac{\langle m^{(0)}|\hat{V}|n^{(0)}\rangle}{E_{n}^{(0)}-E_{m}^{(0)}}+\lambda^{2}\sum_{\ell(\neq n)}\frac{\langle m^{(0)}|\hat{V}|\ell^{(0)}\rangle}{E_{n}^{(0)}-E_{m}^{(0)}}\frac{\langle \ell^{(0)}|\hat{V}|n^{(0)}\rangle}{E_{n}^{(0)}-E_{m}^{(0)}}\right) \\ &-\lambda^{2}\frac{\langle m^{(0)}|\hat{V}|n^{(0)}\rangle\langle n^{(0)}|\hat{V}|n^{(0)}\rangle}{(E_{n}^{(0)}-E_{m}^{(0)})^{2}}-i\lambda^{2}\theta_{n}^{(1)}\frac{\langle m^{(0)}|\hat{V}|n^{(0)}\rangle}{E_{n}^{(0)}-E_{m}^{(0)}}\right)\right] \end{aligned}$$
(2.31)

指数関数を用いているが、あくまでも2次までの展開において等しいことに注意してほしい。この表現は

$$|n(\lambda)\rangle = Z_n^{1/2}(\lambda)|\tilde{n}(\lambda)\rangle \tag{2.32}$$

の形におくことができる。式 (2.31)の右辺 1 行目を $Z_n^{1/2}$ とおく⁷。 $|\tilde{n}(\lambda)\rangle$ は規格化されていない状態であ る。その代わりに、

$$\langle n^{(0)} | \tilde{n}(\lambda) \rangle = 1 \tag{2.33}$$

の条件を満たしている。これは、 $|\tilde{n}(\lambda)\rangle = |n^{(0)}\rangle + \lambda |\tilde{n}^{(1)}\rangle + \cdots$ と展開したときに、0次以外の項には $|n^{(0)}\rangle$ は含まれていないことを意味している。

規格化のための係数 $Z^{1/2}(\lambda)$ はさらに次のように分解される。

$$Z^{1/2}(\lambda) = Z_0^{1/2}(\lambda) Z_1^{1/2}(\lambda)$$
(2.34)

$$Z_0^{1/2}(\lambda) = \exp\left(i\lambda\theta_n^{(1)} + i\lambda^2\theta_n^{(2)} + \cdots\right)$$
(2.35)

$$Z_1^{1/2}(\lambda) = \exp\left(-\frac{\lambda^2}{2} \sum_{m(\neq n)} \frac{\langle n^{(0)} | \hat{V} | m^{(0)} \rangle \langle m^{(0)} | \hat{V} | n^{(0)} \rangle}{(E_n^{(0)} - E_m^{(0)})^2} + \cdots\right)$$
(2.36)

 $^{^{6}}$ 未定部分は直交性を用いても決定できない。問題 [2-2]。 $^{7}1/2$ 乗としたのは、後で導く (2.44) 式で Z を用いたかったからである。

 $Z_0^{1/2}(\lambda) = e^{i\theta_n(\lambda)} = e^{i(\lambda\theta_n^{(1)} + \cdots)}$ は位相の寄与を表す。状態にかかる定数位相は物理的に何の意味ももたないのでこのような不定性が生じることは自然な結果である。よってこの項は無視する。以下では $\theta_n = 0$ とする⁸。 $Z_1(\lambda)$ は絶対値の大きさが1ではないので規格化定数のために必要な係数である。その寄与は λ^2 の補正を与える。したがって、 λ の1次までの補正を考える限りでは $|n(\lambda)\rangle$ の代わりに $|\tilde{n}(\lambda)\rangle$ を用いても違いは生じない。

また、得られた公式より近似がよい条件を正確に求めることができる。単純に考えて $|\lambda| \ll 1$ というの が条件であった。それはそれで間違いないのだが、得られた公式を見てみるともう少し複雑である。状態 $j(n^{(0)})$ から大きくずれてはいけない。1 次補正の項の係数は無次元であり、それが小さいという条件

$$\left| \lambda \frac{\langle m^{(0)} | \hat{V} | n^{(0)} \rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \right| \ll 1 \qquad m \neq n$$
(2.37)

が摂動展開を行うための定量的な条件である。これには3つの定性的な条件が入っている。

- (i) 摂動項全体にかかる c 数係数の大きさが小さい。ここでは λ を入れて $|\lambda| \ll 1$ と表したが、 \hat{V} に入っている無次元係数と考えてもよい。
- (ii) 行列要素 $\langle m^{(0)} | \hat{V} | n^{(0)} \rangle$ が小さい。つまり、 $\hat{V} | n^{(0)} \rangle$ が $| n^{(0)} \rangle$ 以外の固有状態をあまり含んでいなけれ ばよい。無摂動項と摂動項が交換しない場合、 \hat{V} の作用によって $| n^{(0)} \rangle$ は他の状態に遷移する⁹。その 度合いが小さければよい。 $\langle m^{(0)} | \hat{V} | n^{(0)} \rangle$ のどの(m, n) の組み合わせが0 でないかは選択則(selection rule)とよばれる。系のもつ対称性によって決まることが多く、計算を行う前に考察してみるとよい。 ほとんどの組が0 となり (2.31) 式などにあらわれる状態についての無限和を計算することができる 場合がある。
- (iii) Ŷ によって遷移する二つの固有状態のエネルギー差(の大きさ) |E_n⁽⁰⁾ E_m⁽⁰⁾| が大きい。つまり、エネルギー固有値の値が離れていると影響が小さくなる。縮退があるときには次章で扱うが、縮退していなくても十分準位が接近しているときは近似が悪くなる。そのときには縮退しているものとみなして扱った方が近似の精度はよくなる。

条件が (i) のみであればわかりやすいのだが、(ii) や (iii) の条件も重要になることがあるので注意しなけれ ばならない。

2.2.2 一般論*

不定性の問題をどのように扱えばよいかがわかったので、摂動展開をあらためて定式化し直そう。やや 形式的な変形を行う。結果は、(2.43)式をみたす状態に対して(2.47)、(2.55)式にまとめられる。 無摂動八ミルトニアンに対する固有値方程式を

$$\hat{H}_0|n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)}|n^{(0)}\rangle \qquad n = 0, 1, 2, \dots$$
(2.38)

$$\langle m^{(0)} | n^{(0)} \rangle = \delta_{m,n} \tag{2.39}$$

としたときに

$$\hat{H}(\lambda)|n(\lambda)\rangle = E_n(\lambda)|n(\lambda)\rangle$$
(2.40)

を解く。考えている無摂動ハミルトニアンのエネルギー固有値 *E*⁽⁰⁾ に縮退はないとする。 求めるエネルギー固有値を

$$E_n(\lambda) = E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \cdots$$
(2.41)

⁹問題 [2-7] を参照。

⁸その場合、もちろん (2.31) 式 3 行目最後の項も消える。位相変換から消せないように見えるが、むしろこの項は不定性を打ち 消すために導入されている。

と展開する。状態を

$$|n(\lambda)\rangle = Z^{1/2}(\lambda)|\tilde{n}(\lambda)\rangle \tag{2.42}$$

と書いて、 $|n(\lambda)\rangle$ ではなく $|\tilde{n}(\lambda)\rangle$ を求める。 $|\tilde{n}(\lambda)\rangle$ は次の条件を満たす。

$$\langle n^{(0)} | \tilde{n}(\lambda) \rangle = 1 \tag{2.43}$$

規格化定数は

$$Z(\lambda) = \frac{1}{\langle \tilde{n}(\lambda) | \tilde{n}(\lambda) \rangle}$$
(2.44)

より求めることができるので、 $|\tilde{n}(\lambda)\rangle$ がわかれば $|n(\lambda)\rangle$ も求まる。規格化は必要に応じて後で行えばよい。 固有状態を

$$|\tilde{n}(\lambda)\rangle = |n^{(0)}\rangle + \lambda|\tilde{n}^{(1)}\rangle + \lambda^2|\tilde{n}^{(2)}\rangle + \cdots$$
(2.45)

と展開して固有値方程式に代入し各べきを比較する。この計算は前節のものと全く同じであり、

$$\hat{H}_{0}|\tilde{n}^{(k)}\rangle + \hat{V}|\tilde{n}^{(k-1)}\rangle = E_{n}^{(0)}|\tilde{n}^{(k)}\rangle + E_{n}^{(1)}|\tilde{n}^{(k-1)}\rangle + \dots + E_{n}^{(k)}|n^{(0)}\rangle$$
(2.46)

を得る。kは自然数を表す。左から $\langle n^{(0)} |$ をかけて

$$E_n^{(k)} = \langle n^{(0)} | \hat{V} | \tilde{n}^{(k-1)} \rangle \tag{2.47}$$

となる。条件 (2.43) 式を用いていることに注意してほしい。この式は k-1 次の状態 $|\tilde{n}^{(k-1)}\rangle$ がわかれば k 次のエネルギー固有値 $E_n^{(k)}$ が得られることを示している。

状態を求めるために、次の演算子を定義する。

$$\hat{Q}_n = \sum_{m(\neq n)} |m^{(0)}\rangle \langle m^{(0)}| = 1 - |n^{(0)}\rangle \langle n^{(0)}|$$
(2.48)

これは射影演算子を表している。ある状態

$$|\psi\rangle = \sum_{m} |m^{(0)}\rangle \langle m^{(0)}|\psi\rangle$$
(2.49)

に作用させたとき、

$$\hat{Q}_n|\psi\rangle = \sum_{m(\neq n)} |m^{(0)}\rangle \langle m^{(0)}|\psi\rangle$$
(2.50)

となり、 $|n^{(0)}
angle$ の成分を除く役割を果たしている。また、 $\hat{Q}_n^2 = \hat{Q}_n$ であるから、何回かけても同じである。これは射影演算子の要件を満たしている。

さて、(2.46) 式を変形させた式

$$(E_n^{(0)} - \hat{H}_0)|\tilde{n}^{(k)}\rangle = \hat{V}|\tilde{n}^{(k-1)}\rangle - \left(E_n^{(1)}|\tilde{n}^{(k-1)}\rangle + \dots + E_n^{(k-1)}|\tilde{n}^{(1)}\rangle + E_n^{(k)}|n^{(0)}\rangle\right)$$
(2.51)

に演算子

$$\hat{Q}_n \frac{1}{E_n^{(0)} - \hat{H}_0} \hat{Q}_n = \sum_{m(\neq n)} |m^{(0)}\rangle \frac{1}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \langle m^{(0)}|$$
(2.52)

を作用させよう。この演算子は \hat{Q}_n によって射影された状態空間において逆演算子 $\frac{1}{E_n^{(0)}-\hat{H}_0}$ をかけることを意味する。逆演算子は射影された空間では問題なく定義できるから意味をもつ¹⁰。このとき、左辺は

$$\hat{Q}_n \frac{1}{E_n^{(0)} - \hat{H}_0} \hat{Q}_n (E_n^{(0)} - \hat{H}_0) |\tilde{n}^{(k)}\rangle = \hat{Q}_n |\tilde{n}^{(k)}\rangle = |\tilde{n}^{(k)}\rangle$$
(2.53)

 $^{|10|}n^{(0)}\rangle$ を含む空間で $\frac{1}{E_n^{(0)}-\hat{H}_0}$ は不定となってしまう。左右のどちらからでも状態をかけることができるように両側に \hat{Q}_n をかけておく必要がある。

となる。右辺は

$$\hat{Q}_{n} \frac{1}{E_{n}^{(0)} - \hat{H}_{0}} \hat{Q}_{n} \left[\hat{V} | \tilde{n}^{(k-1)} \rangle - \left(E_{n}^{(1)} | \tilde{n}^{(k-1)} \rangle + \dots + E_{n}^{(k-1)} | \tilde{n}^{(1)} \rangle + E_{n}^{(k)} | n^{(0)} \rangle \right) \right]
= \hat{Q}_{n} \frac{1}{E_{n}^{(0)} - \hat{H}_{0}} \hat{Q}_{n} \left[\hat{V} | \tilde{n}^{(k-1)} \rangle - \left(E_{n}^{(1)} | \tilde{n}^{(k-1)} \rangle + \dots + E_{n}^{(k-1)} | \tilde{n}^{(1)} \rangle \right) \right]$$
(2.54)

よって、

$$\tilde{n}^{(k)}\rangle = \hat{Q}_n \frac{1}{E_n^{(0)} - \hat{H}_0} \hat{Q}_n \left[\hat{V} | \tilde{n}^{(k-1)} \rangle - \left(E_n^{(1)} | \tilde{n}^{(k-1)} \rangle + \dots + E_n^{(k-1)} | \tilde{n}^{(1)} \rangle \right) \right]$$
(2.55)

を得る。

これで全ての公式が得られた。式 (2.47) と (2.55) を交互に用いていけば全ての補正項を得ることができる。まず、(2.47) 式で *k* = 1 とおくと

$$E_n^{(1)} = \langle n^{(0)} | \hat{V} | n^{(0)} \rangle \tag{2.56}$$

とエネルギー固有値の一次補正が求まる。次に、(2.55)式で k = 1 とおくと

$$|\tilde{n}^{(1)}\rangle = \hat{Q}_n \frac{1}{E_n^{(0)} - \hat{H}_0} \hat{Q}_n \hat{V} | n^{(0)} \rangle$$
(2.57)

となる。これから (2.47) 式で k = 2 とおいて

$$E_n^{(2)} = \langle n^{(0)} | \hat{V} | \tilde{n}^{(1)} \rangle = \langle n^{(0)} | \hat{V} \hat{Q}_n \frac{1}{E_n^{(0)} - \hat{H}_0} \hat{Q}_n \hat{V} | n^{(0)} \rangle$$
(2.58)

を得る。式 (2.55) で k = 2 とおいて

$$|\tilde{n}^{(2)}\rangle = \hat{Q}_n \frac{1}{E_n^{(0)} - \hat{H}_0} \hat{Q}_n \left(\hat{V} - \langle n^{(0)} | \hat{V} | n^{(0)} \rangle \right) \hat{Q}_n \frac{1}{E_n^{(0)} - \hat{H}_0} \hat{Q}_n \hat{V} | n^{(0)} \rangle$$
(2.59)

となる。高次項も原理的にはこのようにして全て求めることができる。不定性は一切生じない。規格化を 行いたければ (2.44) 式を用いればよい。上で見たように、状態の1次までの寄与を考える場合には Z の寄 与は生じない。また、エネルギー固有値は1次低い状態の補正項で書けるため2次までの計算においては Z の寄与は生じない。多くの計算ではこれくらいの近似ですませるので Z を計算する機会はあまりない。

2.3 例

2.3.1 調和振動子

前節で導いた一般的な公式を具体的な問題に適用してみる。簡単な例として1次元調和振動子を扱おう。

$$\hat{H}_0 = \frac{1}{2m}\hat{p}^2 + \frac{m\omega^2}{2}\hat{x}^2 \tag{2.60}$$

このハミルトニアンのエネルギー固有値は

$$E_n^{(0)} = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega \qquad n = 0, 1, \dots$$
 (2.61)

と与えられている。対応する固有状態は | n⁽⁰⁾) で指定される。

摂動項として次のものを考える。

$$\hat{V} = -F\hat{x} \tag{2.62}$$

これは一定の力 F を (正の x 方向に)加えることを意味する。このとき、エネルギーの1次補正は

$$E_n^{(1)} = \langle n^{(0)} | \hat{V} | n^{(0)} \rangle = -F \langle n^{(0)} | \hat{x} | n^{(0)} \rangle$$
(2.63)

と書ける。最後の表式の期待値は昇降演算子 â[†]、â を用いることで次のように計算される。

$$\langle n^{(0)} | \hat{x} | n^{(0)} \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \langle n^{(0)} | \left(\hat{a} + \hat{a}^{\dagger} \right) | n^{(0)} \rangle = 0$$
 (2.64)

つまり、エネルギーの1次補正は0である。次に状態の1次補正を調べる。公式を用いて

$$|\tilde{n}^{(1)}\rangle = \sum_{m(\neq n)} |m^{(0)}\rangle \frac{\langle m^{(0)} | \hat{V} | n^{(0)} \rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} = -F\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \frac{1}{\hbar\omega} \left[|n - 1^{(0)}\rangle \sqrt{n} - |n + 1^{(0)}\rangle \sqrt{n+1} \right]$$
(2.65)

となる。昇降演算子の性質により \hat{V} をかけることによって状態が 1 つだけずれることがわかる。これより エネルギーの 2 次補正は

$$E_n^{(2)} = \langle n^{(0)} | \hat{V} | \tilde{n}^{(1)} \rangle = -\frac{F^2}{2m\omega^2}$$
(2.66)

となる。高次項も同様にして計算すればよい。この場合の選択則は昇降演算子の性質を用いると簡単にわ かる。座標演算子 *x* は昇降演算子の線形結合で書けるので、摂動項を作用させると状態は1つだけ上か下 のものに遷移する。これを用いると高次項も比較的容易に計算することができる。

気づいていると思うが、この問題は摂動近似を用いなくても解くことができる。摂動項も含めたハミル トニアンは

$$\hat{H}(\lambda) = \hat{H}_0 + \lambda \hat{V} = \frac{1}{2m} \hat{p}^2 + \frac{m\omega^2}{2} \left(\hat{x} - \frac{\lambda F}{m\omega^2} \right)^2 - \frac{\lambda^2 F^2}{2m\omega^2}$$
(2.67)

と書けるから、中心の位置がずれた調和振動子となる。エネルギーは

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega - \frac{\lambda^2 F^2}{2m\omega^2} \tag{2.68}$$

となる。2次までの摂動計算で厳密な結果を与えることがわかる。波動関数は、中心位置がずれただけなので

$$\langle x|n(\lambda)\rangle = \langle x - \lambda x_0|n^{(0)}\rangle$$
 (2.69)

によって与えられる。ここで $x_0 = rac{F}{m\omega^2}$ とおいた。右辺は運動量演算子の性質を用いて

$$\langle x - \lambda x_0 | n^{(0)} \rangle = \langle x | e^{-i\lambda x_0 \hat{p}/\hbar} | n^{(0)} \rangle$$
(2.70)

と変形できるので

$$|n(\lambda)\rangle = e^{-i\lambda x_0 \hat{p}/\hbar} |n^{(0)}\rangle \tag{2.71}$$

となる。これは規格化された状態を表す。 $|\tilde{n}(\lambda)\rangle$ は次のように書くことができる。

$$|\tilde{n}(\lambda)\rangle = \frac{\mathrm{e}^{-i\lambda x_0 \hat{p}/\hbar} |n^{(0)}\rangle}{\langle n^{(0)} | \mathrm{e}^{-i\lambda x_0 \hat{p}/\hbar} |n^{(0)}\rangle}$$
(2.72)

この表式を λ で展開すると 1 次の項は上で求めたものと一致する。

2.3.2 Stark 効果

摂動のもっとも典型的で重要な応用例が水素等原子のスペクトルを求める問題である。原子核と1つの 電子が Coulomb 相互作用している系は厳密に解くことができたが、水素以外の原子では電子が複数あるこ とにより電子間相互作用が働く。また、相対論的効果に起因するスピンや角運動量に依存する相互作用が 存在することによってエネルギー準位に微細構造が生じたり、外部から電磁場をかけることによって準位 がずれる効果が生じたりする。摂動展開はこのような系のエネルギー準位を理解する格好の近似手段であ る。厳密に問題が解けない以上、近似を用いて問題を解くしかない。そしてそのような近似は多くの場合、 実験結果を精度よく記述する¹¹。

本講義ノートでもたびたび水素型原子の問題を考える。前章にまとめたように、原子核が静止している 座標系で電子のハミルトニアンは次のように書ける。

$$\hat{H}_0 = \frac{1}{2m}\hat{p}^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\frac{1}{\hat{r}}$$
(2.73)

束縛状態 |n,ℓ,m⟩は3つの量子数を用いて書け、エネルギー固有値は

$$E_n^{(0)} = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{2n^2 a_{\rm B}} \qquad n = 1, 2, \dots$$
(2.74)

となる。 $(n, \ell, m) = (1, 0, 0)$ が基底状態を表す。 $a_{\rm B}$ は Bohr 半径

$$\frac{1}{a_{\rm B}} = \frac{m}{\hbar^2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \tag{2.75}$$

である。原子番号 Z の原子では $e^2 \rightarrow Ze^2$ とおきかえられる。また、電子が複数ある場合には電子間相互 作用もとりいれなければならない。ここではもっとも単純な Z = 1 で電子も 1 個の水素を扱う。

励起状態は縮退しているため、基底状態のみを考えることにする。注目している準位に縮退がなければ 本章で扱っている縮退のないときの摂動論を適用することができる。基底状態のエネルギーは

$$E_1^{(0)} = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{2a_{\rm B}}$$
(2.76)

固有状態の波動関数は

$$\psi^{(0)}(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} | 1, 0, 0 \rangle = \frac{1}{\sqrt{8\pi}} \left(\frac{2}{a_{\rm B}}\right)^{3/2} e^{-r/a_{\rm B}}$$
(2.77)

と書くことができる。

さて、摂動として系に電場をかけることを考える。電子や原子核は電荷をもっているから電場によって 影響を受ける。電場の効果をとりいれるにはスカラーポテンシャルを用いればよい。一般に、電場 E(r) は スカラーポテンシャル $\phi(r)$ から

$$\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r}) = -\boldsymbol{\nabla}\phi(\boldsymbol{r}) \tag{2.78}$$

と計算される。一定の電場を z 方向にかけるとすると、スカラーポテンシャルは

$$\phi(\mathbf{r}) = -E_z z \tag{2.79}$$

と書けるから、ハミルトニアンに加わる摂動項は

$$V = -eE_z z \tag{2.80}$$

となる。電場によって水素原子のエネルギー準位が変化することは Stark 効果 (Stark effect) とよばれている。この電場によるずれを摂動を用いて解析する。

まず、エネルギーの1次補正は0である。

$$E_1^{(1)} = -eE_z \langle 1, 0, 0 | \hat{z} | 1, 0, 0 \rangle = 0$$
(2.81)

¹¹このような摂動計算でもっとも精密な例は、量子電気力学(quantum electrodynamics)を用いた電子の磁気能率の計算である。 微細構造定数 $\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbarc} \approx \frac{1}{137}$ の5次までの摂動計算を行い1.3兆分の1の精度で計算されている(2012年)。5次というと大したことがないように思えるが、寄与する項(Feynman ダイアグラム)のタイプは12672 種類であり、本章では考えていない粒子の生成消滅過程まで扱う必要がある。また、電磁場の量子化も考えなければならない。スーパーコンピュータを用いて計算するのに9年かかったそうである。

これは波動関数が球対称であることからすぐにわかる。2次補正は

$$E_1^{(2)} = e^2 E_z^2 \sum_{(n,\ell,m)(\neq(1,0,0))} \frac{|\langle n,\ell,m|\hat{z}|1,0,0\rangle|^2}{E_1^{(0)} - E_n^{(0)}}$$
(2.82)

と書ける。この値を計算するためには無限和を計算しなければならない。ここではその計算は行わず、簡 単な近似をしてみよう。次の不等式を用いる。

$$E_1^{(2)} > e^2 E_z^2 \sum_{(n,\ell,m)(\neq(1,0,0))} \frac{|\langle n,\ell,m|\hat{z}|1,0,0\rangle|^2}{E_1^{(0)} - E_2^{(0)}}$$
(2.83)

分母の $E_m^{(0)}$ を $E_2^{(0)}$ におきかえている。このようにおきかえを行うと完全性を用いて和をとることができる。つまり、次のように書ける。

$$E_1^{(2)} > e^2 E_z^2 \frac{\langle 1, 0, 0 | \hat{z}^2 | 1, 0, 0 \rangle - \langle 1, 0, 0 | \hat{z} | 1, 0, 0 \rangle^2}{E_1^{(0)} - E_2^{(0)}} = e^2 E_z^2 \frac{\langle 1, 0, 0 | \hat{z}^2 | 1, 0, 0 \rangle}{E_1^{(0)} - E_2^{(0)}}$$
(2.84)

あとは \hat{z}^2 の基底状態についての期待値を計算すればよい。次のようになる。

$$\langle 1, 0, 0 | \hat{z}^2 | 1, 0, 0 \rangle = \frac{1}{3} \langle 1, 0, 0 | \hat{r}^2 | 1, 0, 0 \rangle = a_{\rm B}^2$$
(2.85)

よって、エネルギーの2次補正の下限が得られる。

$$E_1^{(2)} > -4\pi\epsilon_0 E_z^2 \frac{8a_{\rm B}^3}{3} \tag{2.86}$$

ここでは近似を用いたが、(2.82)式の和は厳密に計算することができる。問題 [2-8] において次の結果を 得る。

$$E_1^{(2)} = -4\pi\epsilon_0 E_z^2 \frac{9a_{\rm B}^3}{4} \tag{2.87}$$

厳密解 $\frac{9}{4} = 2.25$ に対して近似解 $\frac{8}{3} \approx 2.67$ であるから、近似による見積りはそれほど悪くない。

2.4 問題

 $[\mathbf{A}]$

[2-1] 一般的性質(1)

(a). 偶関数ポテンシャル $V_0(x) = V_0(-x)$ 中の1次元束縛状態に対して、奇関数のポテンシャル V(x) = -V(-x) を摂動として考える。このときエネルギー固有値の1次補正は0となることを示せ。

(b). 基底状態について、エネルギー固有値の2次補正は0または負であることを示せ。

(c). ある2つの無摂動状態のエネルギー固有値の間隔が他のエネルギー準位とのものと比較して非常に 小さいとする。摂動を考えたとき、それらの2状態のエネルギー固有値の2次補正の正負を調べよ。

[2-2] 一般的性質(2)

(a). 異なる状態 $|\tilde{n}(\lambda)\rangle \ge |\tilde{m}(\lambda)\rangle$ が直交することを λ の 2 次までで確かめよ。 $\langle m^{(0)}|n^{(0)}\rangle = 0$ ($m \neq n$) とする。

(b). $\langle n^{(0)} | \tilde{n}(\lambda) \rangle = 1$ の条件を満たす $| \tilde{n}(\lambda) \rangle$ について、 $\langle \tilde{n}(\lambda) | \tilde{n}(\lambda) \rangle \geq 1$ であることを示せ。

[2-3] 調和振動子

1次元調和振動子において次の摂動ポテンシャルを考える。

$$V(x) = \lambda x^4 \tag{2-3.1}$$

(a). エネルギーの1次補正を求めよ。

(b). エネルギーが十分大きい励起状態において摂動はよい近似ではないことを確かめ、その理由を考察 せよ。

[2-4] Coulomb 相互作用

Coulomb 相互作用のある電子と原子核の系を考える。原子核は原点に固定されているとして扱う。水素 原子の場合、ハミルトニアンは (2.73) 式のように与えられる。

(a). 原子核は実際には有限の大きさをもっている。原子核の電荷 Ze が半径 R の球内に一様に分布して いると仮定したとき、次のポテンシャルが得られることを示せ。 a = $\frac{a_{\rm B}}{Z}$ とする。

$$V(r) = \begin{cases} -\frac{\hbar^2}{ma} \frac{1}{R} \left(\frac{3}{2} - \frac{r^2}{2R^2}\right) & 0 \le r \le R\\ -\frac{\hbar^2}{ma} \frac{1}{r} & R \le r \end{cases}$$
(2-4.1)

(b). (a) でポテンシャル $V_0(r) = -\frac{\hbar^2}{ma} \frac{1}{r}$ からのずれを摂動として扱う。電子が1つ存在する系について、 基底エネルギーを1次補正まで計算せよ。ただし、 $\frac{R}{a} \ll 1$ として結果をできるだけ(0とならない範囲で) 近似してよい。 (c). ヘリウム原子は2つの電子と Z = 2の原子核からなり、電子間相互作用のエネルギーが生じる。ハ ミルトニアンは次のように与えられる。

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left(\hat{p}_1^2 + \hat{p}_2^2 \right) + \frac{\hbar^2}{ma_{\rm B}} \left(-\frac{2}{\hat{r}_1} - \frac{2}{\hat{r}_2} + \frac{1}{|\hat{r}_1 - \hat{r}_2|} \right)$$
(2-4.2)

電子間相互作用の項(最後の項)を摂動として扱ったとき、基底エネルギーを1次補正まで計算せよ。

$[\mathbf{B}]$

[2-5] 2 準位系

ハミルトニアンが行列表示で次のように与えられる2準位系を考える。

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} \epsilon_1 & v \\ v & \epsilon_2 \end{pmatrix}$$
(2-5.1)

 ϵ_1 、 ϵ_2 、v は実数であり、 $\epsilon_1 > \epsilon_2$ 、v > 0とする。

(a). 非対角項(vの項)を摂動として扱う。エネルギー固有値を摂動の2次まで、固有状態を摂動の1次 までの近似で求めよ。

(b). 対角項(ϵ_1 、 ϵ_2)を摂動として扱ったとき、固有値を摂動の2次まで、固有状態を摂動の1次までの近似で求めよ。

(c). 固有値・固有状態を厳密に求め、展開を行い、(a)、(b)の結果が再現されることを示せ。

[2-6] 井戸型ポテンシャル

井戸型ポテンシャル中の1次元系を考える。

$$V_0(x) = \begin{cases} \infty & |x| > L \\ 0 & |x| < L \end{cases}$$
(2-6.1)

系が基底状態にあるとする。次の摂動ポテンシャルを考えたとき、エネルギー固有値、波動関数をそれぞ れ計算せよ。

(a). $V_1(x) = \begin{cases} 0 & |x| > \frac{L}{2} \\ v & |x| < \frac{L}{2} \end{cases}$ (b). $V_1(x) = \lambda x$

計算は非自明な(0でない)寄与が出る次数まで行え。高励起状態の効果は全てとりこまず、もっとも大き な寄与があると思われるものをとりいれよ。

また、結果に対する考察を行え(エネルギー補正項の正負や波動関数のかたよりぐあいについて等)。

[2-7] 調和振動子と磁場

3次元、調和振動子ポテンシャル中の粒子に磁場をかける。

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}(\hat{p} - e\hat{A})^2 + \frac{m\omega^2}{2}\hat{r}^2$$
(2-7.1)

$$\hat{A} = (-B\hat{y}, 0, 0) \tag{2-7.2}$$

磁場 B を摂動として扱う。磁場がないときの基底状態のエネルギー固有値が磁場によってどれだけ変化するかを B の 2 次までの近似で求めよ。

[2-8] エネルギーの2次補正

次の式を満たす演算子 $\hat{\Omega}$ を考える。

$$\hat{V} = [\hat{\Omega}, \hat{H}_0] \tag{2-8.1}$$

(a). エネルギーの2次補正の公式をΩを用いて表せ。

(b). 第 2.3.1 節の調和振動子の例において (2-8.1) 式を満たす演算子 $\hat{\Omega}$ を求め、エネルギーの 2 次補正 を計算せよ。

(c). 第 2.3.2 節の Stark 効果の例において、基底状態の波動関数 $\psi^{(0)}(r)$ に対して

$$V(\mathbf{r})\psi^{(0)}(r) = [\Omega(\mathbf{r}), H_0]\psi^{(0)}(r)$$
(2-8.2)

を満たす関数 $\Omega(\mathbf{r})$ を見つけることができる。 $\Omega(\mathbf{r}) = f(r) \cos \theta$ とおいて方程式を解いて関数 f(r) を求め よ。また、その結果を用いて (2.87) 式を導け。

[2-9] 演算子による状態の変化

(a). 一般に、規格化された状態 $|\psi\rangle$ に任意のエルミート演算子 \hat{V} を作用させたとき、次のように書けることを示せ。

$$\hat{V}|\psi\rangle = |\psi\rangle\langle\psi|\hat{V}|\psi\rangle + |\psi^{\perp}\rangle\sqrt{\langle\psi|\hat{V}^{2}|\psi\rangle - \langle\psi|\hat{V}|\psi\rangle^{2}}$$
(2-9.1)

 $|\psi^{\perp}\rangle$ は $|\psi\rangle$ と直交する規格化された状態を表す。

(b). (a) で $|\psi\rangle=|n^{(0)}\rangle,\,\hat{V}$ を摂動ハミルトニアンとする。このとき定義される $|n^{(0)\perp}\rangle$ を用いて、 $E_n^{(2)}$ が

$$E_n^{(2)} = \langle n^{(0)\perp} | \hat{X} | n^{(0)\perp} \rangle \tag{2-9.2}$$

と書けることを示し、演算子 \hat{X} を求めよ。

[2-10] 状態間の距離

2 つの状態 $|\phi\rangle$ 、 $|\psi\rangle$ を考える。これらは規格化されているとする。このとき、2 状態の内積の絶対値の 2 乗を次のように書く。

$$|\langle \phi | \psi \rangle|^2 = 1 - s^2 \tag{2-10.1}$$

sはFubini-Study距離 (Fubini-Study distance)とよばれる。

(a). $|\psi\rangle = |\phi\rangle + |\delta\rangle$ とおいたとき、 s^2 が次のように書けることを示せ。

$$s^{2} = \langle \delta | (1 - |\phi\rangle \langle \phi |) | \delta \rangle \tag{2-10.2}$$

(b). $|\phi\rangle$ を無摂動ハミルトニアンの固有状態 $|n^{(0)}\rangle$ 、 $|\psi\rangle$ を摂動 \hat{V} があるときの規格化された固有状態と する。このとき、 s^2 を摂動の 2 次までの近似で求めよ。

(c). 摂動がよい近似であるためには $s^2 \ll 1$ でなければならない。(b) の結果を用いて摂動の近似条件を導け。

[2-11] 摂動公式の導出

実数パラメータ λ を含むハミルトニアン $\hat{H}(\lambda)$ を考える。

(a). エネルギー固有値のひとつを $E_n(\lambda)$ 、対応する規格化された固有状態を $|n(\lambda)\rangle$ とする。このとき、次の Hellmann–Feynman の定理 (Hellmann–Feynman theorem) を示せ。

$$\frac{\partial E_n(\lambda)}{\partial \lambda} = \langle n(\lambda) | \frac{\partial \hat{H}(\lambda)}{\partial \lambda} | n(\lambda) \rangle \tag{2-11.1}$$

(b). (a) の公式の応用として、(2.1) 式のハミルトニアンを考える。固有値および固有関数をそれぞれ (2.5)、(2.6) 式のように展開する。このとき、 $E_n^{(k)}$ を $\{|n^{(\ell)}\rangle\}_{\ell=0,1,\dots,k-1}$ を用いて表せ。

(c).(b)で得た公式と本文で得られたものの違いについて考察せよ。

[2-12] 準位統計(1)

2 準位系を考える。ハミルトニアンは (2–5.1) 式のように書ける。各成分は実数とするが、[2–5] で考えた不等式の条件は課さない。

(a). エネルギーギャップ(2準位のエネルギー差。 非負の量) △ E を求めよ。

(b). 次のような確率分布に従うハミルトニアンの統計集団を考える。

$$P(H)dH = C \exp\left(-\frac{a^2}{2} \operatorname{Tr} \hat{H}^2\right) d\epsilon_1 d\epsilon_2 dv \qquad (2-12.1)$$

a は実定数、C は規格化定数を表す。このときエネルギーギャップ ΔE の統計平均を考える。次のギャップ 分布関数を計算せよ。

$$p(x) = \int \delta(x - \Delta E) P(H) dH \qquad (2-12.2)$$

(c). ハミルトニアンを次のように変更する。

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} \epsilon_1 & v \\ v^* & \epsilon_2 \end{pmatrix}$$
(2-12.3)

 $v = v_1 + iv_2$ は複素数である。確率分布は次のように与えられる。

$$P(H)dH = C \exp\left(-\frac{a^2}{2} \operatorname{Tr} \hat{H}^2\right) d\epsilon_1 d\epsilon_2 dv_1 dv_2 \qquad (2-12.4)$$

このときギャップ分布関数を計算せよ。

[2-13] 準位統計(2)

(a). 式 (2-5.1) の2準位ハミルトニアンを

$$\hat{H} = U(\theta) \begin{pmatrix} E_1 & 0\\ 0 & E_2 \end{pmatrix} U^{\dagger}(\theta)$$
(2-13.1)

と書く。 $\hat{U}(\theta)$ はユニタリー(直交)行列であり、適当なパラメータ θ を用いて表される。このとき、 ϵ_1 、 ϵ_2 、vから E_1 、 E_2 、 θ への変数変換のヤコビアンを求めよ。余裕があれば、前問(c)の複素の場合にも同様の計算を行え。

(b). 各エネルギー準位が $E \ge E + dE$ の間にある確率が ρdE であるとする。 ρ は正定数を表す。この とき、ギャップ分布関数が

$$p(x) = C \mathrm{e}^{-\rho x} \tag{2-13.2}$$

となることを示せ。*C*は比例定数を表す。

[2-14] van der Waals 相互作用

二つの水素原子の系を考える。図 2.2 のように、それぞれの原子は電荷 e > 0 の原子核と電荷 -e の電子からなり、4 粒子はお互いに Coulomb 力によって相互作用している。他の相互作用や内部自由度は無視する。

(a). 二つの原子核は十分重く、固定されているとする。この系のハミルトニアンを書き下せ。

(b). $r = |\mathbf{r}| \gg |\mathbf{r}_{1,2}|$ のとき、異なる原子間の相互作用を摂動として扱う。摂動ポテンシャルを 1/rで展開したとき、主要な寄与は 3 乗の項 $1/r^3$ であることを示せ。

(c). 無摂動のときに基底状態にあるとする。摂動によって生じる相互作用の主要な寄与は 1/r⁶ の次数であることを示せ。具体的な値を計算する必要はないが、その相互作用の符号がどうなるかを調べよ。



図 2.2: 二つの水素原子の系。

第3章 定常状態の摂動論(2)

前節で扱った摂動展開は考えている準位に縮退のないときであった。本章では縮退のあるときの摂動展開の方法を定式化する。

3.1 束縛状態における摂動論: 縮退のあるとき

縮退があるとこれまでの公式が適用できないことは、補正項の分母にある固有値の差が0になってしまうことからわかる。本章ではその場合にどうすればよいかを考察する。ここでは簡単のため、準位1と2が縮退していて他は縮退していない場合を考える。

前章で各項のべきを比較することにより1次で次の式が得られた(29ページ(2.12)式)。

$$E_m^{(0)} \langle m^{(0)} | \tilde{n}^{(1)} \rangle + \langle m^{(0)} | \hat{V} | n^{(0)} \rangle = E_n^{(0)} \langle m^{(0)} | \tilde{n}^{(1)} \rangle + E_n^{(1)} \delta_{m,n}$$
(3.1)

 $m = n \ \varepsilon \ \delta \ \zeta \ \varepsilon$

$$E_n^{(1)} = \langle n^{(0)} | \hat{V} | n^{(0)} \rangle \tag{3.2}$$

であるから問題なくエネルギー補正が求まるように見える。ところが、例えばm = 1、n = 2とおいてみると

$$E_2^{(0)} \langle 2^{(0)} | \tilde{1}^{(1)} \rangle + \langle 2^{(0)} | \hat{V} | 1^{(0)} \rangle = E_1^{(0)} \langle 2^{(0)} | \tilde{1}^{(1)} \rangle$$
(3.3)

である。今の場合、 $E_1^{(0)} = E_2^{(0)}$ であるから

$$\langle 2^{(0)} | \hat{V} | 1^{(0)} \rangle = 0 \tag{3.4}$$

を得る。一般にこの式は満たされるとは限らない。展開してべきを比較しただけなのにどこがいけなかったのだろうか。

ここで気づくべきことは、縮退している2つの状態は一意的に定まらないことである。複数の状態が無 摂動ハミルトニアンに対して同じエネルギー固有値を与えるということは、これらの状態の任意の線形結 合を考えても固有値は変わらない。つまり、基底を変更することができる。この任意性を利用すれば \hat{V} の 行列を縮退している空間で対角化することができる。そのようにすれば (3.4) 式は満たされ問題は生じない だろう。つまり、ハミルトニアンがある基底で

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} E_1^{(0)} & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & E_1^{(0)} & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & E_3^{(0)} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \langle 1^{(0)} | \hat{V} | 1^{(0)} \rangle & \langle 1^{(0)} | \hat{V} | 2^{(0)} \rangle & \langle 1^{(0)} | \hat{V} | 3^{(0)} \rangle & \cdots \\ \langle 2^{(0)} | \hat{V} | 1^{(0)} \rangle & \langle 2^{(0)} | \hat{V} | 2^{(0)} \rangle & \langle 2^{(0)} | \hat{V} | 3^{(0)} \rangle & \cdots \\ \langle 3^{(0)} | \hat{V} | 1^{(0)} \rangle & \langle 3^{(0)} | \hat{V} | 2^{(0)} \rangle & \langle 3^{(0)} | \hat{V} | 3^{(0)} \rangle & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}$$
(3.5)

と書けているときに、適当なユニタリー変換を行うと

$$\hat{U}\hat{H}\hat{U}^{\dagger} = \begin{pmatrix}
E_{1}^{(0)} & 0 & 0 & \cdots \\
0 & E_{1}^{(0)} & 0 & \cdots \\
0 & 0 & E_{3}^{(0)} & \cdots \\
\vdots & \vdots & \vdots & \ddots
\end{pmatrix} + \begin{pmatrix}
\langle 1^{\prime(0)}|\hat{V}|1^{\prime(0)}\rangle & 0 & \langle 1^{\prime(0)}|\hat{V}|3^{(0)}\rangle & \cdots \\
0 & \langle 2^{\prime(0)}|\hat{V}|2^{\prime(0)}\rangle & \langle 2^{\prime(0)}|\hat{V}|3^{(0)}\rangle & \cdots \\
\langle 3^{(0)}|\hat{V}|1^{\prime(0)}\rangle & \langle 3^{(0)}|\hat{V}|2^{\prime(0)}\rangle & \langle 3^{(0)}|\hat{V}|3^{(0)}\rangle & \cdots \\
\vdots & \vdots & \vdots & \ddots
\end{pmatrix}$$
(3.6)

とすることができる。このようにした基底の下で公式を用いれば矛盾は生じない。そのときのエネルギー 固有値の1次補正は

$$E_1^{(1)} = \langle 1'^{(0)} | \hat{V} | 1'^{(0)} \rangle \tag{3.7}$$

$$E_2^{(1)} = \langle 2'^{(0)} | \hat{V} | 2'^{(0)} \rangle \tag{3.8}$$

$$E_k^{(1)} = \langle k^{(0)} | \hat{V} | k^{(0)} \rangle \qquad (k = 3, 4, \ldots)$$
(3.9)

となる。部分対角化を行ってから縮退のないときの公式を適用すればよい。

記法の煩雑さを避けるため、ここから 1' を 1、2' を 2 と書くことにする。最初から縮退している部分が 対角化されていると思えばよい。状態の 1 次補正を考えよう。縮退のない部分については前章と同じよう にして計算できる。すなわち、(3.1) 式で $m \neq n$ 、 $n \neq 1, 2$ とすれば

$$\langle m^{(0)} | \tilde{n}^{(1)} \rangle = \frac{\langle m^{(0)} | \hat{V} | n^{(0)} \rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}$$
(3.10)

となって $|\tilde{n}^{(1)}\rangle$ を

$$|\tilde{n}^{(1)}\rangle = \sum_{m(\neq n)} |m^{(0)}\rangle \langle m^{(0)}|\tilde{n}^{(1)}\rangle$$
 (3.11)

と展開したときの係数を求めることができる。 $\langle 1^{(0)}|\tilde{2}^{(1)}\rangle$ および $\langle 2^{(0)}|\tilde{1}^{(1)}\rangle$ は (3.1)式では定まらない¹。これらを決定するためには 2 次の項を調べればよい。

2次の式を考える。

$$(E_n^{(0)} - \hat{H}_0)|\tilde{n}^{(2)}\rangle + (E_n^{(1)} - \hat{V})|\tilde{n}^{(1)}\rangle + E_n^{(2)}|n^{(0)}\rangle = 0$$
(3.12)

$$(E_n^{(0)} - E_m^{(0)})\langle m^{(0)} | \tilde{n}^{(2)} \rangle + E_n^{(1)} \langle m^{(0)} | \tilde{n}^{(1)} \rangle + E_n^{(2)} \delta_{m,n} = \langle m^{(0)} | \hat{V} | \tilde{n}^{(1)} \rangle$$
(3.13)

m=2、n=1とおくと

$$E_1^{(1)} \langle 2^{(0)} | \tilde{1}^{(1)} \rangle = \langle 2^{(0)} | \hat{V} | \tilde{1}^{(1)} \rangle$$
(3.14a)

$$= \langle 2^{(0)} | \hat{V} | 2^{(0)} \rangle \langle 2^{(0)} | \tilde{1}^{(1)} \rangle + \sum_{m \ge 3} \langle 2^{(0)} | \hat{V} | m^{(0)} \rangle \frac{\langle m^{(0)} | \hat{V} | 1^{(0)} \rangle}{E_1^{(0)} - E_m^{(0)}}$$
(3.14b)

$$= E_2^{(1)} \langle 2^{(0)} | \tilde{1}^{(1)} \rangle + \langle 2^{(0)} | \hat{V} \hat{Q} \frac{1}{E_1^{(0)} - \hat{H}_0} \hat{Q} \hat{V} | 1^{(0)} \rangle$$
(3.14c)

である。ここで

$$\hat{Q} = 1 - |1^{(0)}\rangle \langle 1^{(0)}| - |2^{(0)}\rangle \langle 2^{(0)}|$$
(3.15)

を用いた。これは縮退していない状態空間への射影演算子である。前章でも用いたように、この演算子によって射影された状態空間では逆演算子 $1/(E_1^{(0)} - \hat{H}_0)$ を問題なく定義することができる。 $E_1^{(1)} \neq E_2^{(1)}$ とすれば

$$\langle 2^{(0)} | \tilde{1}^{(1)} \rangle = \frac{1}{E_1^{(1)} - E_2^{(1)}} \langle 2^{(0)} | \hat{V} \hat{Q} \frac{1}{E_1^{(0)} - \hat{H}_0} \hat{Q} \hat{V} | 1^{(0)} \rangle$$
(3.16)

となる。演算子 \hat{V} が 2 つあるので 2 次のように見えるが、分母にエネルギーの 1 次補正 $E^{(1)}$ があるので 1 次になる。同様にして m = 1、n = 2 のとき、

$$E_2^{(1)}\langle 1^{(0)} | \tilde{2}^{(1)} \rangle = \langle 1^{(0)} | \hat{V} | \tilde{2}^{(1)} \rangle \tag{3.17}$$

$$\langle 1^{(0)} | \tilde{2}^{(1)} \rangle = \frac{1}{E_2^{(1)} - E_1^{(1)}} \langle 1^{(0)} | \hat{V} \hat{Q} \frac{1}{E_2^{(0)} - \hat{H}_0} \hat{Q} \hat{V} | 2^{(0)} \rangle$$
(3.18)

 ${}^1\langle n^{(0)}|\tilde{n}^{(1)}
angle=0$ であることに注意。式 (2.33) (31 ページ) の規格化条件を用いている。

となる。まとめると

$$|\tilde{1}^{(1)}\rangle = |2^{(0)}\rangle \frac{1}{E_1^{(1)} - E_2^{(1)}} \langle 2^{(0)} | \hat{V}\hat{Q} \frac{1}{E_1^{(0)} - \hat{H}_0} \hat{Q}\hat{V} | 1^{(0)}\rangle + \sum_{m \ge 3} |m^{(0)}\rangle \frac{\langle m^{(0)} | \hat{V} | 1^{(0)} \rangle}{E_1^{(0)} - E_m^{(0)}}$$
(3.19)

$$|\tilde{2}^{(1)}\rangle = |1^{(0)}\rangle \frac{1}{E_2^{(1)} - E_1^{(1)}} \langle 1^{(0)} | \hat{V}\hat{Q} \frac{1}{E_2^{(0)} - \hat{H}_0} \hat{Q}\hat{V} | 2^{(0)}\rangle + \sum_{m \ge 3} |m^{(0)}\rangle \frac{\langle m^{(0)} | \hat{V} | 2^{(0)} \rangle}{E_2^{(0)} - E_m^{(0)}}$$
(3.20)

$$|\tilde{k}^{(1)}\rangle = \sum_{m(\neq k)} |m^{(0)}\rangle \frac{\langle m^{(0)} | \hat{V} | k^{(0)} \rangle}{E_k^{(0)} - E_m^{(0)}} \qquad (k = 3, 4, \ldots)$$
(3.21)

である。エネルギーの2次補正は

$$E_n^{(2)} = \langle n^{(0)} | \hat{V} | \tilde{n}^{(1)} \rangle \tag{3.22}$$

より計算される。

以上で縮退のあるときの公式を導くことができた。縮退している場合の摂動論は定式化が厄介であるが、 エネルギーの1次補正のみを計算するのであればそれほど大変な労力は要しない。縮退している空間で摂 動項を行列表示してそれを対角化するだけである。多くの場合縮退の数は1のオーダーなので、元の状態 空間が無限であったとしても有限の状態空間で対角化することができる。縮退している準位については状 態の1次補正は少し複雑なものとなる。

さて、まだ問題が残されている。 $E_1^{(1)} = E_2^{(1)}$ のとき、つまり 1 次補正によって縮退が解けないとき、上で求めた状態についての公式は正しくない。式 (3.14)より

$$\langle 2^{(0)} | \hat{V} \hat{Q} \frac{1}{E_1^{(0)} - \hat{H}_0} \hat{Q} \hat{V} | 1^{(0)} \rangle = 0$$
(3.23)

となって矛盾が生じてしまう。この場合どうすればよいだろうか。ここまでくれば予想がつくと思われる。 残されている任意性を用いてこの式が矛盾しないようにすればよいのである。各自で考えてほしい(問題 [3-6])。

3.2 例

3.2.1 3準位の系

次の例を扱う。

$$\hat{H}_{0} = \begin{pmatrix} \epsilon & 0 & 0 \\ 0 & \epsilon & 0 \\ 0 & 0 & \epsilon' \end{pmatrix}, \qquad \hat{V} = \begin{pmatrix} 0 & v_{0} & v_{1} \\ v_{0} & 0 & v_{2} \\ v_{1} & v_{2} & 0 \end{pmatrix}$$
(3.24)

 ϵ 、 ϵ' 、 v_0 、 v_1 、 v_2 は実数であり、 $\epsilon \neq \epsilon'$ とする。

無摂動状態は準位1と2が縮退している。この部分でのハミルトニアンは

$$\hat{H} \to \begin{pmatrix} \epsilon & v_0 \\ v_0 & \epsilon \end{pmatrix}$$
(3.25)

であるので、対角化は

$$\begin{pmatrix} \epsilon & v_0 \\ v_0 & \epsilon \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \epsilon + v_0 & 0 \\ 0 & \epsilon - v_0 \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}$$
(3.26)

とできる。よって、元の状態空間でユニタリー(直交)変換を

$$\hat{U} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0\\ \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0\\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$
(3.27)

とすると

$$\hat{H}' = \hat{U}\hat{H}\hat{U}^{\dagger} = \begin{pmatrix} \epsilon & 0 & 0\\ 0 & \epsilon & 0\\ 0 & 0 & \epsilon' \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} v_0 & 0 & \frac{v_1 + v_2}{\sqrt{2}}\\ 0 & -v_0 & \frac{v_1 - v_2}{\sqrt{2}}\\ \frac{v_1 + v_2}{\sqrt{2}} & \frac{v_1 - v_2}{\sqrt{2}} & 0 \end{pmatrix}$$
(3.28)

となる。第1項が基底変換後の \hat{H}_0 、第2項が摂動項 \hat{V}_0 を表す。これより、エネルギーの1次までは対角 項を読みとるだけであり

$$E_n^{(0)} = \{\epsilon, \epsilon, \epsilon'\} \tag{3.29}$$

$$E_n^{(1)} = \{v_0, -v_0, 0\}$$
(3.30)

と求まる。

ユニタリー変換を行った後の基底において、

$$\hat{V}\hat{Q}\frac{1}{E_{1}^{(0)}-\hat{H}_{0}}\hat{Q}\hat{V} = \frac{1}{\epsilon - \epsilon'} \left(v_{1}^{2}|1'^{(0)}\rangle\langle 1'^{(0)}| + v_{1}v_{2}2|1'^{(0)}\rangle\langle 2'^{(0)}| + v_{1}v_{2}|2'^{(0)}\rangle\langle 1'^{(0)}| + v_{2}^{2}|2'^{(0)}\rangle\langle 2'^{(0)}| \right)$$

$$(3.31)$$

であるから

$$|\tilde{1}^{\prime(1)}\rangle = |2^{\prime(0)}\rangle \frac{v_1 v_2}{2v_0} + |3^{(0)}\rangle \frac{v_1 + v_2}{\sqrt{2}(\epsilon - \epsilon')}$$
(3.32)

$$|\tilde{2}^{\prime(1)}\rangle = -|1^{\prime(0)}\rangle \frac{v_1 v_2}{2v_0} + |3^{(0)}\rangle \frac{v_1 - v_2}{\sqrt{2}(\epsilon - \epsilon')}$$
(3.33)

$$|\tilde{3}^{(1)}\rangle = |1'^{(0)}\rangle \frac{v_1 + v_2}{\sqrt{2}(\epsilon' - \epsilon)} + |2'^{(0)}\rangle \frac{v_1 - v_2}{\sqrt{2}(\epsilon' - \epsilon)}$$
(3.34)

となる。エネルギー固有値の2次補正は

$$E_n^{(2)} = \left\{ \frac{(v_1 + v_2)^2}{2(\epsilon - \epsilon')}, \frac{(v_1 - v_2)^2}{2(\epsilon - \epsilon')}, -\frac{v_1^2 + v_2^2}{\epsilon - \epsilon'} \right\}$$
(3.35)

と計算される。

ー般論でも注意したように、状態の1次補正には v_1v_2/v_0 のような項が存在する。ここでは v_0 、 v_1 、 v_2 を同程度の量とみなして展開を行っているので v_1v_2/v_0 の項は摂動の1次補正として扱われる。どれかが極端に小さいか大きいというような状況をこの近似で表すことはできない。展開パラメータが複数あるときの摂動展開はそれらのパラメータの大小によっていろんなパターンがあるので一般の場合の公式を得ることは難しい。それぞれの状況に応じて展開の仕方を変更する(公式を作り直す)必要がある(問題[3-7])。

3.2.2 Stark 効果

前章では水素原子の基底状態について電場をかけたときの補正を計算した。ここでは励起状態の場合を 考える。*n* = 2 の第一励起状態は4 重に縮退しており、波動関数は次のように書ける。

$$\psi_{2,0,0}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{2a_{\rm B}^3}} e^{-\rho/2} \left(1 - \frac{\rho}{2}\right) \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$$
(3.36)

$$\psi_{2,1,1}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2\sqrt{6a_{\rm B}^3}} e^{-\rho/2} \rho \frac{-1}{\sqrt{4\pi}} \sqrt{\frac{3}{2}} e^{i\varphi} \sin\theta$$
(3.37)

$$\psi_{2,1,0}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2\sqrt{6a_{\rm B}^3}} e^{-\rho/2} \rho \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \sqrt{3} \cos\theta$$
(3.38)

$$\psi_{2,1,-1}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2\sqrt{6a_{\rm B}^3}} e^{-\rho/2} \rho \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \sqrt{\frac{3}{2}} e^{-i\varphi} \sin\theta$$
(3.39)

添字は量子数 (n, ℓ, m) を表す。 $\rho = r/a_{\rm B}$ とした。 摂動項はこれらの 4 状態の空間において

$$\hat{V} = -eE_z \hat{z} \to -3eE_z a_{\rm B} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$
(3.40)

と計算することができる。基底は上で挙げた波動関数の順番に並べている。 $\langle 2,0,0|\hat{V}|2,1,0\rangle$ および $\langle 2,1,0|\hat{V}|2,0,0\rangle$ が有限で残りは 0 となる。よって、m = 0の状態が $\pm 3eE_za_B$ に分裂する。他の 2 状態は 1 次の近似の範囲では縮退したままである。

m = 0の状態のみが摂動に敏感であるのは対称性から理解できる。摂動項は角運動量のz成分と交換する。

$$[\hat{V}, \hat{L}_z] = 0 \tag{3.41}$$

したがって、この式に左から $\langle n, \ell, m |$ 、右から $|n', \ell', m' \rangle$ をかけることによって

$$(m'-m)\langle n,\ell,m|\hat{V}|n',\ell',m'\rangle = 0$$
 (3.42)

がいえる。つまり、 $m \neq m'$ であれば $\langle n, \ell, m | \hat{V} | n', \ell', m' \rangle = 0$ である。この場合の選択則である。

3.3 問題

 $[\mathbf{A}]$

[3-1] 3 準位系

第3.2.1節の3準位系の例を考える。

(a). 固有値を厳密に求めるための3次方程式 *f*(*x*) = 0 を導け。

(b). 3 次方程式を \hat{V} についてのべき展開を用いて摂動的に解く。方程式の解のひとつを次のように展開 する。

$$x = \epsilon + \delta_1 + \delta_2 + \delta_3 + \cdots \tag{3-1.1}$$

3次までの解を求め、摂動の一般論との対応を調べよ。

[3-2] 縮退のあるときの摂動

無摂動状態において縮退のある系を考える。状態1,2,...,gが縮退しており残りは縮退していないとする。

(a). 縮退している状態空間への射影演算子を \hat{P} 、残りの空間への射影演算子を $\hat{Q} = 1 - \hat{P}$ とする。次の式を導け。

$$\hat{P}(E_n(\lambda) - \hat{H}_0 - \lambda \hat{V})\hat{P}|\tilde{n}(\lambda)\rangle = \lambda \hat{P}\hat{V}\hat{Q}|n(\lambda)\rangle$$
(3-2.1)

$$\hat{Q}(E_n(\lambda) - \hat{H}_0 - \lambda \hat{V})\hat{Q}|\tilde{n}(\lambda)\rangle = \lambda \hat{Q}\hat{V}\hat{P}|\tilde{n}(\lambda)\rangle$$
(3-2.2)

(b). (a) の式において摂動の1次で成り立つ式を書き下せ。

(c). (b) で得た式を調べることにより、エネルギーの1次補正が縮退している準位では

$$\det(E_n^{(1)} - \hat{P}\hat{V}\hat{P}) = 0 \tag{3-2.3}$$

を解くことにより決まり、縮退していない準位では

$$E_n^{(1)} = \langle n^{(0)} | \hat{V} | n^{(0)} \rangle \tag{3-2.4}$$

となることを示せ。

(d). 同様にして、(a) の式を変形して状態の1次補正を求めよ。

[3-3] 自由度2の調和振動子

次のハミルトニアンを考える。

$$\hat{H}_0 = \frac{1}{2m} (\hat{p}_1^2 + \hat{p}_2^2) + \frac{m\omega^2}{2} (\hat{x}_1^2 + \hat{x}_2^2)$$
(3-3.1)

$$\hat{V} = m\omega^2 \delta \hat{x}_1 \hat{x}_2 \tag{3-3.2}$$

δを展開パラメータとする。

(a). \hat{H}_0 の基底状態、第1励起状態、第2励起状態について、エネルギー固有値の1次摂動によるずれ をそれぞれ調べよ。

(b). 厳密解を求め、近似解と比較せよ。

(c). (b)の厳密解について、エネルギー準位を下からいくつか δ の関数として図示せよ。適当な描画ソフトを用いてよい。

[3-4] 水素原子

水素原子の系を考える。無摂動ハミルトニアンは (2.73) 式 (36 ページ) で与えられる。電子のスピン自 由度を考慮すると全ての状態は 2 重縮退している。

次の項を考える。

$$\hat{V}_1 = \lambda_1 \hat{\boldsymbol{L}} \cdot \hat{\boldsymbol{S}} \tag{3-4.1}$$

$$\hat{V}_2 = \lambda_2 \boldsymbol{B} \cdot \left(\hat{\boldsymbol{L}} + g\hat{\boldsymbol{S}}\right) \tag{3-4.2}$$

 \hat{L} は軌道角運動量演算子、 \hat{S} はスピン演算子を表す。gはg因子とよばれる定数である。スピン量子数は S = 1/2である($\hat{S}^2 = S(S+1)\hbar^2$)。 \hat{V}_1 はスピン–軌道相互作用を表し、 \hat{V}_2 は磁場 Bをかけることにより生じる。

(a). $\hat{H}_0 + \hat{V}_1$ の固有値・固有状態を求めよ。

(b). $\hat{H}_0 + \hat{V}_1$ を無摂動ハミルトニアン、 \hat{V}_2 を摂動項として扱った場合、エネルギー固有値を摂動の 1 次まで求めよ。

(c). $\hat{H}_0 + \hat{V}_2$ を無摂動ハミルトニアン、 \hat{V}_1 を摂動項として扱った場合を考えよ。

[3-5] 2 つのスピン

2つの1/2スピンの系を考える。ハミルトニアンを

$$\hat{H}_0 = J\hat{\boldsymbol{S}}_1 \cdot \hat{\boldsymbol{S}}_2 \tag{3-5.1}$$

$$\hat{V} = B_1 \hat{S}_1^z + B_2 \hat{S}_2^z \tag{3-5.2}$$

とする。

(a). Ŷを摂動として扱ったとき、エネルギー固有値および固有状態を1次までの近似で求めよ。

(b). $\hat{H}_0 + \hat{V}$ を対角化してエネルギー固有値を厳密に求め、(a)の解と比較せよ。

(c). (a) で $B_1 + B_2 = 0$ のとき、1 次のエネルギー準位に縮退が生じる。得られた結果に問題があるかどうか調べよ。

[C]

[3-6] 縮退のあるときの摂動

エネルギーの縮退が1次の補正でも解けないときの摂動論を考察し、第3.2.1節の例で $v_0 = 0$ の場合に適用せよ。

[3-7] 摂動項が複数あるときの公式

ハミルトニアンを

$$\hat{H}(\lambda) = \hat{H}_0 + \lambda \hat{V}_1 + \lambda^2 \hat{V}_2 \tag{3-7.1}$$

とする。

(a). λ の 2 次までの摂動公式を導け。簡単のため、縮退はないとせよ。

(b). (a) で導いた公式を用いて問題 [2-7] を解け。

第4章 時間に依存する系の摂動論

ここまでの章では定常状態の問題を扱ってきた。ハミルトニアンは時間によらず、エネルギーは保存す る。Schrödinger 方程式はエネルギー準位を決める固有値方程式を解くことに帰着する。本章と次章で量子 系のダイナミクスの問題を扱う。ハミルトニアンが時間に依存する場合にはエネルギーは保存しないから、 問題の解き方を考え直さなければならない。これまでの解析では固有値方程式を解くことばかりに執着し てきたが、それは量子力学の一面に過ぎない。ダイナミクスの問題は量子系を制御するという視点も加わ り、さまざまな応用がある。まず本章では、摂動展開の方法を定式化し典型的な応用問題を扱う。

4.1 時間依存 Schrödinger 方程式

4.1.1 定常状態と非定常状態

出発点は時間依存 Schrödinger 方程式である。

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle = \hat{H}(t)|\psi(t)\rangle \tag{4.1}$$

力学の問題などでくりかえし扱われてきたように、与えられたハミルトニアン $\hat{H}(t)$ と初期状態 $|\psi(0)\rangle$ に対して時間発展状態 $|\psi(t)\rangle$ を求めるのが基本的な問題である。

ハミルトニアン演算子は一般に時間に依存する。これまでに扱ってきた座標 \hat{x} や運動量 \hat{p} 、スピン \hat{S} などの演算子は時間に関係なく定義されていた。時間依存性を考える場合、新たに特別な演算子を導入するわけではなく、時間に依存する係数を用いて

$$\hat{X}(t) = \sum_{\mu} c_{\mu}(t) \hat{X}_{\mu}$$
(4.2)

とすればよい。 \dot{X}_{μ} は考えている Hilbert 空間における演算子、 $c_{\mu}(t)$ は時間に依存する c 数関数である¹。 時間微分演算子はこの範疇に入っていないことに注意してほしい。時間依存 Schrödinger 方程式は、状態に時間微分演算子を作用させることがハミルトニアンを作用させることと等価であることを意味している ($H \rightarrow i\hbar\partial_t$)。このように見ると、時間とハミルトニアン(エネルギー)の関係は座標と運動量の共役 関係に似ている ($p \rightarrow -i\hbar\partial_x$)。運動量が空間並進を表すことに対してハミルトニアンは時間推進を表す。 ところが、時間は演算子ではないという違いがある。後に時間とエネルギーの不確定性関係とでもよぶべき式があらわれるが(問題 [5–7])、その意味は座標と運動量に対するものとは異なる。時間微分演算子の取り扱いは次章で周期系を扱うときに議論する。

ハミルトニアンとして次の形を考える。

$$\hat{H}(t) = \hat{H}_0 + \hat{V}(t)$$
(4.3)

時間依存性は第2項にのみ入っている。この項を摂動として扱うことを想定している置き方である。 \hat{H}_0 しかない定常状態の系に摂動項 $\hat{V}(t)$ を加えたら状態はどのような変化をするだろうかというのが問題設定である。 $\hat{V}(t)$ としてはある時間より前では0、ある時間から有限になるようにするとわかりやすい。外部からわずかに電磁場をかけて系の反応を見るなど、現実的にも自然な問題設定である。

¹Hilbert 空間が指定され、それが有限の次元をもてばその空間において作用する演算子(の数)は自動的に全て決まる。例えば 2 次元の空間におけるエルミート演算子は単位演算子と 3 つの Pauli 演算子である。N 次元の系において独立なエルミート演算子の 数は N^2 個ある。

さて、 \hat{V} が0のときは \hat{H}_0 の固有状態で状態を表すことができる。固有値方程式を

$$\hat{H}_0|n\rangle = E_n|n\rangle \tag{4.4}$$

とすると、系の状態は固有状態の適当な線形結合で書ける。

$$\psi^{(0)}(t)\rangle = \sum_{n} e^{-iE_{n}(t-t_{0})/\hbar} |n\rangle \langle n|\psi^{(0)}(t_{0})\rangle$$
(4.5)

 $|\psi^{(0)}(t_0)\rangle$ は時間 t_0 での状態である。考えている系に応じた初期条件によって決まる。したがって考えるべきことは固有値 E_n と固有状態 $|n\rangle$ を求めることである。定常状態といえども状態は時間依存する。ただ、時間依存性は各エネルギー固有値で決まるものであり、指数関数の形 $e^{-iE_nt/\hbar}$ で表されている。時間 t において、状態が固有状態 $|n\rangle$ にある確率は

$$P_n(t) = |\langle n|\psi^{(0)}(t)\rangle|^2 = |\langle n|\psi^{(0)}(0)\rangle|^2$$
(4.6)

で与えられる。これは時間に依存しない。つまり、初期状態としてある特定の固有状態に確率1でいる系 を考えると系はいつまでもその状態に居続ける。時間依存性は

$$|\psi^{(0)}(t)\rangle = \mathrm{e}^{-iE_n(t-t_0)/\hbar}|n\rangle \tag{4.7}$$

のようになる。初期状態としていろんな固有状態が混ざっているものをとると各固有状態は異なる振動数 で時間的に振動し、時間依存性は一般に複雑になる。それでも各固有状態の存在確率は時間によらず一定 である。

ハミルトニアンに時間に依存する項 $\hat{V}(t)$ が存在したときの時間発展は複雑なものになる。一般にどのように考えたらよいかであるが、まずそもそも固有状態という考え方が意味をなさなくなるように思える。ある瞬間に特定の固有状態にいたとしても次の瞬間にはハミルトニアンが変化し固有状態ではなくなるからである²。では固有状態は全く意味がないのかというとそうでもない。適当なエルミート演算子の固有状態の組は完全系を構成するため、時間に依存する状態であっても固有状態の展開を行うことができる。 \hat{H}_0 の固有状態 $|n\rangle$ を用いると、

$$\psi(t)\rangle = \sum_{n} |n\rangle\langle n|\psi(t)\rangle$$
(4.8)

である。時間依存係数を

$$\langle n|\psi(t)\rangle = c_n(t)\mathrm{e}^{-iE_nt/\hbar} \tag{4.9}$$

とおく。 $\mathrm{e}^{-iE_t/\hbar}$ をつけて係数関数 $c_n(t)$ を定義する³。状態を時間 t で固有状態 |n
angleを見出す確率は

$$P_n(t) = |\langle n|\psi(t)\rangle|^2 = |c_n(t)|^2$$
(4.10)

で与えられる。 $c_n(t)$ の時間依存性を求めることは時間依存 Schrödinger 方程式を解くことに他ならない。 具体的に方程式に代入してみると

$$\sum_{m} i\hbar \frac{\mathrm{d}c_m(t)}{\mathrm{d}t} \mathrm{e}^{-iE_m t/\hbar} |m\rangle = \sum_{m} c_m(t) \mathrm{e}^{-iE_m t/\hbar} \hat{V}(t) |m\rangle$$
(4.11)

である。 左から (n) をかけて固有状態の正規直交性を用いると

$$i\hbar \frac{\mathrm{d}c_n(t)}{\mathrm{d}t} = \sum_m c_m(t) \mathrm{e}^{i(E_n - E_m)t/\hbar} \langle n|\hat{V}(t)|m\rangle$$
(4.12)

を得る。これは関数の組 $\{c_n(t)\}$ の連立方程式を表す。近似を一切用いていないため、元の Schrödinger 方 程式と等価な方程式である⁴。一般にこれを解くのは難しいため、以下では摂動展開の方法を用いて解を求 める。

²各瞬間のハミルトニアンの固有状態を用いればよいと考えるかもしれないが、うまくいかない。次章で議論する。

 $^{^{3}}$ そのように $c_{n}(t)$ を定義しておくと、 $\hat{V}(t)=0$ のとき c_{n} は定数となる。

 $^{{}^4}c_n(t)$ をベクトルの成分、 $e^{i(E_n-E_m)t/\hbar}\langle n|\hat{V}(t)|m\rangle = \langle n|e^{i\hat{H}_0t/\hbar}\hat{V}(t)e^{-i\hat{H}_0t/\hbar}|m\rangle$ を行列成分とみなすと、Heisenberg の行列力学の形式になっている。また、第 4.1.4 節を参照。

4.1.2 摂動展開

 $\hat{V}(t)$ を摂動項として扱い、解を求める。求めるべきものは係数関数 $c_n(t)$ であるからそれを前章で行ったように展開する。

$$c_n(t) = c_n^{(0)}(t) + c_n^{(1)}(t) + \cdots$$
(4.13)

上付きの添字は前章と同様に含んでいる \hat{V} の数を表している⁵。これを (4.12) 式に代入して両辺を各次数 毎に等置する。0 次の項は

$$i\hbar \frac{\mathrm{d}c_n^{(0)}(t)}{\mathrm{d}t} = 0 \tag{4.14}$$

であるから、 $c_n^{(0)}$ が時間に依存しないという定常状態の結果を与える。1次の項を書き下してみると

$$i\hbar \frac{\mathrm{d}c_n^{(1)}(t)}{\mathrm{d}t} = \sum_m c_m^{(0)} \mathrm{e}^{i(E_n - E_m)t/\hbar} \langle n | \hat{V}(t) | m \rangle$$
(4.15)

である。積分すると

$$c_n^{(1)}(t) = \frac{1}{i\hbar} \sum_m c_m^{(0)} \int_{t_0}^t \mathrm{d}t' \,\mathrm{e}^{i(E_n - E_m)t'/\hbar} \langle n | \hat{V}(t') | m \rangle \tag{4.16}$$

と書ける。 t_0 は初期時刻を表す。初期状態を $|n_0
angle$ とすれば $c_n^{(0)} = \delta_{n,n_0}$ であり、

$$c_n^{(1)}(t) = \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t \mathrm{d}t' \,\mathrm{e}^{i(E_n - E_{n_0})t'/\hbar} \langle n | \hat{V}(t') | n_0 \rangle \tag{4.17}$$

となる。高次も同様に表現できる(問題 [4-2])。あとは具体的な問題に応じて $c_n^{(k)}(t)$ をほしい次数だけ計算すれば確率分布 $P_n(t)$ が近似的に求まる。

4.1.3 時間発展演算子と時間順序積*

 $c_n^{(k)}(t)$ は $c_n^{(k-1)}(t)$ の初期時刻からtまでの時間積分を用いて表される。つまり、 $c_n^{(k)}(t)$ を得るためには $c_n^{(k-1)}(t)$ の過去の情報を全て必要とする。時間に依存するハミルトニアンを扱うことがいかにややこしいかを見るために別の表現を考えてみよう。

時間依存しないハミルトニアンに対する Schrödinger 方程式は

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle = \hat{H}|\psi(t)\rangle$$
(4.18)

であるが、その解は形式的に

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t)|\psi(0)\rangle \tag{4.19}$$

と書くことができる。初期時間を t = 0 とし、初期状態を $|\psi(0)\rangle$ とした。時間発展演算子 (time evolution operator) $\hat{U}(t)$ は

$$\hat{U}(t) = \mathrm{e}^{-i\hat{H}t/\hbar} \tag{4.20}$$

となる。これはユニタリー演算子であるから確率が保存されることは明らかである($\langle \psi(t) | \psi(t) \rangle = \langle \psi(0) | \psi(0) \rangle$)。 これで解が求まったように見えるが、 $\hat{U}(t)$ が状態に作用してどのようになるかは具体的にはわからないの で形式的な解である。それでもこの表現を元にしていろいろなことがわかる。

 $^{{}^{5}}$ 式 (4.3) で $\hat{V}(t) \rightarrow \lambda \hat{V}(t)$ とすると $c_{n}^{(k)}(t)$ は λ^{k} の項を表す。 $\hat{V}(t)$ の個数で容易に判断できるので λ は省略した。



図 4.1:時間積分の領域。式 (4.25) 第3項の積分は色のついた領域について行う。

ハミルトニアンが時間依存する場合に同じことを考えてみよう。

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \hat{H}(t)|\psi(t)\rangle$$
(4.21)

この場合も指数関数の肩にハミルトニアンをのせればよいように思える。時間に依存するので t をかける 代わりに t について積分して

$$\hat{U}(t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_0^t \mathrm{d}t' \,\hat{H}(t')\right) \qquad (?) \tag{4.22}$$

とするのが自然な拡張である。ところが、この表式は一般に正しくない。ハミルトニアンが時間に依存す るということは、異なる時間でハミルトニアンは異なる演算子になっていることを意味する。それらの演 算子は一般に交換しない。上の式ではこの非可換性を考慮していないのである。

Schrödinger 方程式を0からtまで積分する。

$$|\psi(t)\rangle = |\psi(0)\rangle - \frac{i}{\hbar} \int_0^t \mathrm{d}t' \,\hat{H}(t')|\psi(t')\rangle \tag{4.23}$$

右辺に $|\psi(t)\rangle$ があらわれているから方程式が解けたわけではない。右辺の $|\psi(t)\rangle$ に左辺の $|\psi(t)\rangle$ を代入すると

$$|\psi(t)\rangle = |\psi(0)\rangle - \frac{i}{\hbar} \int_0^t \mathrm{d}t' \,\hat{H}(t') \left[|\psi(0)\rangle - \frac{i}{\hbar} \int_0^{t'} \mathrm{d}t'' \,\hat{H}(t'') |\psi(t'')\rangle \right] \tag{4.24}$$

となり、また $|\psi(t)\rangle$ が右辺にあらわれる。くりかえすとハミルトニアンについてのべき展開表示が得られる。

$$|\psi(t)\rangle = \left[1 - \frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' \,\hat{H}(t') + \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_0^t dt' \,\hat{H}(t') \int_0^{t'} dt'' \,\hat{H}(t'') + \cdots\right] |\psi(0)\rangle \tag{4.25}$$

2次の項(第3項)を詳しく見てみよう。この項は図のような領域に渡って積分を行っている。 $t'' \ge 0$ からtまで積分し、 $t' \ge 0$ からtまで積分する。t''の積分範囲がt'に依存するのは煩わしいため、両変数の積分範囲を0からtまでに変更する。図で言うと、 $0 \le t' \le t$ 、 $0 \le t'' \le t$ の正方形を積分領域とする。その代わりに被積分関数を修正する。

$$\int_{0}^{t} \mathrm{d}t' \,\hat{H}(t') \int_{0}^{t'} \mathrm{d}t'' \,\hat{H}(t'') = \frac{1}{2} \int_{0}^{t} \mathrm{d}t' \int_{0}^{t} \mathrm{d}t'' \,\mathrm{T}\hat{H}(t') \hat{H}(t'')$$
(4.26)

被積分関数は次のように書ける。

$$T\hat{H}(t')\hat{H}(t'') = \hat{H}(t')\hat{H}(t'')\theta(t'-t'') + \hat{H}(t'')\hat{H}(t')\theta(t''-t')$$
(4.27)

 $\theta(t)$ は階段関数である。引数が正のとき 1、負のとき 0 となる⁶。これは時間が大きい方の演算子を左側に 配置することを意味している。右から左へ時間順序に演算子が並んでいるので時間順序積(time-ordered product)とよばれている。記号 T が演算子を時間順序に並べる操作を表している。

 $^{^{6}0}$ のときは0でも1でもよいが、Fourier 変換を用いた定義では1/2ととるのが自然である。いずれにしてもその違いは見えない。

このような表現を用いると時間発展演算子を便利な形に書くことができる。

$$\hat{U}(t) = 1 - \frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' \,\hat{H}(t') + \frac{1}{2} \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_0^t dt_1 \int_0^t dt_2 \,\mathrm{T}\hat{H}(t_1)\hat{H}(t_2) + \frac{1}{3!} \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^3 \int_0^t dt_1 \int_0^t dt_2 \int_0^t dt_3 \,\mathrm{T}\hat{H}(t_1)\hat{H}(t_2)\hat{H}(t_3) + \cdots$$
(4.28)

1/2 や 1/3! のような係数は時間順序積に書きかえるときに生じる因子である。この展開は指数関数の展開 と同じ形をもっていることがわかるので、形式的に

$$\hat{U}(t) = \operatorname{Texp}\left(-\frac{i}{\hbar} \int_0^t \mathrm{d}t' \,\hat{H}(t')\right) \tag{4.29}$$

と書くことができる。このように時間順序積を用いると時間依存ハミルトニアンの場合にも時間発展演算 子をコンパクトな形にまとめることができる。もちろんこれは形式的な表現である。時間を離散化すると 次のように書くことができる。

$$\hat{U}(t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t)\delta t\right)\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t-\delta t)\delta t\right)\cdots\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(\delta t)\delta t\right)\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(0)\delta t\right)$$
(4.30)

各項を計算してかけあわせて $\delta t \to 0$ の極限をとることは非常に難しいが、経路積分表示を行う際の出発点 となるため重要な表現である。以下で行う摂動展開の方法ではべき展開を行うことによって各展開項を計 算する。

4.1.4 相互作用描像*

時間発展演算子を用いた摂動展開の方法を定式化する。時間依存する系の摂動展開は既に行っているが、 ここではより形式的な展開を定式化する。考えるハミルトニアンは前と同じものとする。

$$\hat{H}(t) = \hat{H}_0 + \hat{V}(t)$$
(4.31)

時間依存項 $\hat{V}(t)$ を摂動として扱う。

前節では時間発展演算子をハミルトニアンで展開していた。 $\hat{V}(t)$ で展開を行うために、相互作用描像 (interaction picture)の状態を次のように定義する⁷。

$$|\psi_{\rm I}(t)\rangle = {\rm e}^{iH_0t/\hbar}|\psi(t)\rangle \tag{4.32}$$

Schrödinger 描像の状態に $e^{iH_0t/\hbar}$ の演算子をかけている。この状態の満たす運動方程式は

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi_{\rm I}(t)\rangle = \hat{V}_{\rm I}(t)|\psi_{\rm I}(t)\rangle \tag{4.33}$$

となる。ここで相互作用描像の演算子 $\hat{V}_{\mathrm{I}}(t)$ を

$$\hat{V}_{\rm I}(t) = {\rm e}^{i\hat{H}_0 t/\hbar} \hat{V}(t) {\rm e}^{-i\hat{H}_0 t/\hbar}$$
(4.34)

と定義した。 $\hat{V}(t)$ は Schrödinger 描像の演算子である。

このように相互作用描像を用いると時間発展は $\hat{V}_{\mathrm{I}}(t)$ によって記述される。時間発展演算子を用いると

$$|\psi_{\mathbf{I}}(t)\rangle = \hat{U}_{\mathbf{I}}(t)|\psi(0)\rangle \tag{4.35}$$

と書けて

$$\hat{U}_{\mathrm{I}}(t) = \mathrm{T} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_{0}^{t} \mathrm{d}t' \, \hat{V}_{\mathrm{I}}(t')\right) = 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{0}^{t} \mathrm{d}t' \, \hat{V}_{\mathrm{I}}(t') + \cdots$$
(4.36)

⁷Dirac 描像 (Dirac picture) ともよばれる。

と展開できる。これは $\hat{V}(t)$ の展開なので摂動計算に用いることができる。

相互作用描像はSchrödinger 描像とHeisenberg 描像の中間的な表現である。通常用いているのがSchrödinger 描像で、時間発展演算子の部分を物理量演算子におしつけたのがHeisenberg 描像である。相互作用描像は 全ハミルトニアンの代わりにハミルトニアンの一部を状態におしつける。摂動論を形式的に議論するとき に便利な表現である。無摂動ハミルトニアンの時間発展演算子 e^{-iĤot/ħ} が式にあらわに現れないので煩雑 な表記を避けることができる。他の使い方としては、相互作用描像にするとハミルトニアンが時間に依存 しなくなるなど簡単になって問題を解くことができる場合がある。いずれにしても、状態や演算子はユニ タリー変換の分だけ変化しているので Schrödinger 描像での状態などを求めるときには最後に戻すことを 忘れないようにする必要がある。

4.2 時間依存摂動の例

いくつかの典型的な時間摂動の例を考える。摂動を時間的に突然加える、ゆっくりと徐々に加える、周期的な摂動を加えるなどの例を調べ特徴を探る。

4.2.1 有限時間に働く摂動

次の形の摂動項を考えてみよう。

$$\hat{V}(t) = \hat{V} \exp\left(-\frac{t^2}{2\tau^2}\right) \tag{4.37}$$

 \hat{V} は適当な演算子、 τ は正のパラメータを表す。初期時刻を $t_0 = -\infty$ としてポテンシャル \hat{V} を印加して 消していく。 $\tau \to 0$ とすると t = 0 で瞬間的に摂動を加えることを意味しており、 $\tau \to \infty$ であればゆっく りとした準静的な過程である。このとき、 $t \to \infty$ で異なる状態に遷移する確率はどうなるかを考えるのが 問題である。

1次摂動の公式を用いると

$$c_n^{(1)}(t) = \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^t dt' \exp\left(-\frac{t'^2}{2\tau^2} + i\frac{E_n - E_{n_0}}{\hbar}t'\right) \langle n|\hat{V}|n_0\rangle$$
(4.38)

である。 $t \to \infty$ で時間に関する積分を行って

$$c_n^{(1)}(\infty) = \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}t' \exp\left(-\frac{t'^2}{2\tau^2} + i\frac{E_n - E_{n_0}}{\hbar}t'\right) \langle n|\hat{V}|n_0\rangle$$
(4.39a)

$$= \frac{1}{i\hbar}\sqrt{2\pi\tau}\exp\left[-\frac{(E_n - E_{n_0})^2\tau^2}{\hbar^2}\right]\langle n|\hat{V}|n_0\rangle$$
(4.39b)

 $\tau \to 0$ で $|c_n^{(1)}(\infty)|^2$ は τ^2 に比例して小さくなる。これは、瞬間的に有限の摂動を加えることによる影響は小さいことを意味する。ただし、 $\delta(t)$ に比例するようなポテンシャルをかける場合には遷移確率は 0 にならない。 $\langle n|\hat{V}|n_0\rangle$ の値が 0 とならない限り遷移が生じる。逆の極限 $\tau \to \infty$ では、指数関数の部分が $E_n \neq E_{n_0}$ である限り非常に小さい値となる。つまり、異なるエネルギーの状態に遷移することはほとんどない。 摂動項をゆっくり印加して切っていくとその影響は無視できる。

このように、両極限、特に $\tau \to \infty$ で遷移確率は小さい。中間的な大きさの τ で遷移が最も生じやすい。 その目安はエネルギー差で決まることが指数関数の部分を見ることでわかる。

上の例ではわかりやすくするために具体的な時間依存性を考えたが、考察を一般化することもできる。 摂動項 $\hat{V}(t)$ に対して、1 次の係数は $t \to \infty$ で

$$c_n^{(1)}(\infty) = \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}t \,\mathrm{e}^{i\omega_{nn_0}t} \langle n|\hat{V}(t)|n_0\rangle \tag{4.40}$$

と書ける。 $\omega_{nn_0} = (E_n - E_{n_0})/\hbar$ である。 $\hat{V}(t)$ の時間依存性が次のようなものであるとする。

$$\langle n|\hat{V}(t)|n_0\rangle = f_{nn_0}(t/\tau) \tag{4.41}$$

f は適当な関数である。 τ は上で導入したパラメータと同じ意味をもつ。このとき、

$$c_n^{(1)}(\infty) = \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dt \, e^{i\omega_{nn_0}t} f_{nn_0}(t/\tau) = \frac{\tau}{i\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dz \, e^{i\omega_{nn_0}\tau z} f_{n,n_0}(z)$$
(4.42)

と変形できる。瞬間的に摂動を加える $\tau \to 0$ の場合、f の積分値が有限である限り、 $c_n^{(1)}(\infty) \propto \tau$ なので 遷移確率は 0 に近づく。 $\tau \to \infty$ の場合は次のように書くことにより性質を理解できる。

$$f_n^{(1)}(\infty) = \frac{\tau}{i\hbar} \tilde{f}_{nn_0}(\omega_{nn_0}\tau)$$
(4.43)

 \tilde{f} は f の Fourier 変換を表している。 $\tau \to \infty$ では周波数 ω が大きい成分の $\tilde{f}(\omega)$ からの寄与が支配的となる。ところが、f がゆっくりと変動する関数である場合、 $\tilde{f}(\omega)$ は ω が小さい成分のみをもち、大きい成分をほとんどもたない。したがって、ゆっくり変動させるときも遷移確率は非常に小さい値となる。

 $\tau \to \infty$ の場合はハミルトニアンをゆっくりと変化させる断熱過程 (adiabatic process)を表す。熱力学における断熱過程とよく似た概念であるが、ここでは熱は関係なく、単純にゆっくりとハミルトニアンを変化させる準静的過程 (quasi-static process)と考えればよい。そのような場合、時間変化が限りなく小さいため、系の状態を静的に扱うことができるはずである。問題 [4–5] でゆっくり印加する摂動を考える。また、次章で摂動とは異なる近似を用いた扱いを考える。

4.2.2 周期変化する摂動

次に、摂動項が周期的に振動している場合を考えよう。

$$\hat{V}(t) = \hat{V} e^{-i\omega t} + \hat{V}^{\dagger} e^{i\omega t}$$
(4.44)

 ω が振動の周波数を表す。初期状態として無摂動ハミルトニアンの固有状態 $|n_0
angle$ を考えると、摂動の 1 次補正項の係数 $c_n^{(1)}(t)$ は (4.17) 式より次のように計算される。

$$c_{n}^{(1)}(t) = \frac{1}{i\hbar} \int_{0}^{t} dt' e^{i(E_{n} - E_{n_{0}})t'/\hbar} \langle n|\hat{V}(t')|n_{0}\rangle$$

$$= -\frac{i}{\hbar} \left\{ \frac{\sin\left[\frac{1}{2}\left(\frac{E_{n} - E_{n_{0}}}{\hbar} - \omega\right)t\right]}{\frac{1}{2}\left(\frac{E_{n} - E_{n_{0}}}{\hbar} - \omega\right)} \exp\left[\frac{i}{2}\left(\frac{E_{n} - E_{n_{0}}}{\hbar} - \omega\right)t\right] \langle n|\hat{V}|n_{0}\rangle$$

$$+ \frac{\sin\left[\frac{1}{2}\left(\frac{E_{n} - E_{n_{0}}}{\hbar} + \omega\right)t\right]}{\frac{1}{2}\left(\frac{E_{n} - E_{n_{0}}}{\hbar} + \omega\right)} \exp\left[\frac{i}{2}\left(\frac{E_{n} - E_{n_{0}}}{\hbar} + \omega\right)t\right] \langle n|\hat{V}^{\dagger}|n_{0}\rangle \right\}$$

$$(4.45a)$$

$$(4.45b)$$

離散準位の系

まず、状態 $|n\rangle$ への遷移が有限であるためには $\langle n|\hat{V}|n_0\rangle$ または $\langle n|\hat{V}^{\dagger}|n_0\rangle$ が有限でなければならない。 摂動項の演算子がどのような状態に遷移するかを決める。

 $\langle n|\hat{V}|n_0
angle$ が有限であったとして第一項のみを取り出してみよう。このときの遷移確率は

$$|c_n^{(1)}(t)|^2 = \frac{1}{\hbar^2} \left\{ \frac{\sin\left[\frac{1}{2}\left(\frac{E_n - E_{n_0}}{\hbar} - \omega\right)t\right]}{\frac{1}{2}\left(\frac{E_n - E_{n_0}}{\hbar} - \omega\right)} \right\}^2 |\langle n|\hat{V}|n_0\rangle|^2$$

$$(4.46)$$

となる。次の関数の時間依存性が遷移確率のふるまいを決める。

$$f(t,\alpha) = \left(\frac{\sin \alpha t}{\alpha}\right)^2 \tag{4.47}$$



図 4.2: 式 (4.47)の関数 $f(t, \alpha)$ のふるまい。

図 4.2 に α の関数としてのふるまいを示す。振動する関数であり、 $\alpha = 0$ で大きな振幅をもつ。時間を大きくすると原点での値は t^2 で発散する。同時に振幅の幅は 1/t で現象して鋭いピークをもつようになってくる。つまり、時間がたつと $\alpha = 0$ 、すなわちエネルギーが

$$E_n = E_{n_0} + \hbar\omega \tag{4.48}$$

となる遷移が支配的になる。摂動項の周波数がエネルギーを励起させる効果を果たしている。第2項は

$$E_n = E_{n_0} - \hbar\omega \tag{4.49}$$

のときの遷移が大きくなる。このようにして振動する摂動項を加えることによってエネルギーが異なる状 態に遷移させることができる。振動の周波数がエネルギーを与えることは時間発展演算子の形から理解で きる結果である。

連続準位の系

状態がたくさんあり準位が連続している系では、ある特定の準位に遷移する確率を求めるよりあるエネ ルギー幅にこれくらい遷移するというようにした方が都合がよい。つまり、遷移確率ではなく遷移確率密 度を求める。終状態が連続的に分布している場合、エネルギーが *E* と *E* + d*E* の間に存在する準位の数を

$$\mathrm{d}N \sim \rho(E)\mathrm{d}E\tag{4.50}$$

と書いて準位密度 $\rho(E)$ を定義する。

離散準位のときに見たように、関数 $f(t, \alpha)$ は $t \to \infty$ で $\alpha = 0$ に鋭いピークをもつ。次の公式を示すこ とができる(問題 [4–3])。

$$\lim_{t \to \infty} \frac{f(t)}{t} = \lim_{t \to \infty} \frac{\sin^2 \alpha t}{\alpha^2 t} = \pi \delta(\alpha)$$
(4.51)

これを用いると、十分時間がたったとき遷移確率は時間に比例して増大する。単位時間あたりの遷移率を 定義することができて

$$\lim_{t \to \infty} \frac{|c_n^{(1)}(t)|^2}{t} \sim \frac{2\pi}{\hbar} |\langle n|\hat{V}|n_0\rangle|^2 \delta\left(E_n - E_{n_0} - \hbar\omega\right)$$
(4.52)

という形で書くことができる。連続的な終状態を考慮するといろんな状態について和をとる必要がある。 *E_n ~ E* であるような状態について和をとり

$$\lim_{t \to \infty} \sum_{\substack{n \\ (E_n \sim E)}} \frac{|c_n^{(1)}(t)|^2}{t} \sim \frac{2\pi}{\hbar} \int \mathrm{d}E_n \,\rho(E_n) \delta\left(E_n - E_{n_0} - \hbar\omega\right) |\langle n|\hat{V}|n_0\rangle|^2 \tag{4.53}$$

となる。遷移率は $E_n = E_{n_0} + \hbar \omega$ での状態密度と $|\langle n | \hat{V} | n_0 \rangle|^2$ に比例している。これを Fermi の黄金律 (Fermi golden rule) という。

4.3 問題

$[\mathbf{A}]$

[4-1] 相互作用描像

相互作用描像を用いて摂動展開を定式化し、(4.16)式の係数 $c_n^{(1)}(t)$ の表現を求めよ。

[4-2] 摂動の2次の公式

- (a). 時間依存摂動について、2次の係数 $c_n^{(2)}(t)$ の表現を求めよ。
- (b). 規格化条件

$$1 = \sum_{n} |c_n(t)|^2 = \sum_{n} \left| c_n^{(0)}(t) + c_n^{(1)}(t) + c_n^{(2)}(t) + \dots \right|^2$$
(4-2.1)

が成り立っていることを2次までの次数で確認せよ。初期条件を $c_n(t_0) = \delta_{n,n_0}$ とする。

[4-3] デルタ関数の公式

次の公式を示せ。

$$\lim_{t \to \infty} \frac{\sin^2 \alpha t}{\alpha^2 t} = \pi \delta(\alpha) \tag{4-3.1}$$

$[\mathbf{B}]$

[4-4] 散乱の Born 近似

ポテンシャル V(r) 中の散乱問題を考える。ポテンシャルを摂動として扱い、Fermiの黄金律を用いる。 入射および散乱粒子の波動関数は波数 k で特徴づけられ、

$$\psi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{\sqrt{L^3}} e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}$$
(4-4.1)

と書ける。L³は体積を表す。遷移率を単位時間単位断面積に入射する粒子数を割ることによって Born 近 似の散乱断面積

$$\sigma = \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2}\right)^2 \left| \int d^3 \boldsymbol{r} \, V(r) \mathrm{e}^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} \right|^2 \tag{4-4.2}$$

を導け。

[4-5] ゆっくり印加する摂動

次のハミルトニアンを考える。

$$\hat{H}(t) = \hat{H}_0 + \hat{V}(t) \tag{4-5.1}$$

$$\hat{V}(0) = 0, \qquad \hat{V}(\infty) = \hat{V}_0$$
(4-5.2)

 $\hat{V}(t)$ の時間依存性は非常に弱く、0から \hat{V}_0 へゆっくりと変動する。t=0および $t=\infty$ での固有値・固有状態をそれぞれ次のようにおく。

$$\hat{H}_0|n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)}|n^{(0)}\rangle \tag{4-5.3}$$

$$(\hat{H}_0 + \hat{V}_0)|n\rangle = E_n|n\rangle \tag{4-5.4}$$

縮退はないとする。

(a). \hat{V}_0 を摂動として扱ったとき、t = 0 での固有値・固有状態を用いて $t = \infty$ での固有値・固有状態を 摂動の 1 次近似で表せ。

(b). t = 0 で状態が $|n^{(0)}\rangle$ にあったとする。相互作用描像での状態

$$|\psi_{\mathrm{I}}(t)\rangle = \sum_{m} c_{m}(t)|m^{(0)}\rangle \tag{4-5.5}$$

について、摂動の1次近似を用いて次の式を示せ。

$$\begin{aligned} |\psi_{\rm I}(t)\rangle &\sim \left(1 - \frac{i}{\hbar} \int_0^t {\rm d}t' \,\langle n^{(0)} | \hat{V}(t') | n^{(0)} \rangle \right) |n^{(0)}\rangle - \sum_{m(\neq n)} {\rm e}^{\frac{i}{\hbar} (E_m^{(0)} - E_n^{(0)})t} |m^{(0)}\rangle \frac{\langle m^{(0)} | \hat{V}(t) | n^{(0)} \rangle}{E_m^{(0)} - E_n^{(0)}} \\ &+ \sum_{m(\neq n)} \int_0^t {\rm d}t' \, {\rm e}^{\frac{i}{\hbar} (E_m^{(0)} - E_n^{(0)})t'} |m^{(0)}\rangle \frac{\langle m^{(0)} | \frac{\partial \hat{V}(t')}{\partial t'} | n^{(0)} \rangle}{E_m^{(0)} - E_n^{(0)}} \tag{4-5.6}$$

最後の項は小さいとして以下では無視する。

(c). ハミルトニアンが $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}_0$ 、初期状態が $|n\rangle$ であるとき、時間発展状態の相互作用表示を $|n_{\rm I}(t)\rangle = {\rm e}^{i\hat{H}_0t/\hbar}|n(t)\rangle$ とする。摂動の 1 次近似を用いて、次の式が成り立つことを示せ。

$$|n_{\rm I}(t \to \infty)\rangle = e^{i\theta} |\psi_{\rm I}(t \to \infty)\rangle$$
 (4-5.7)

 θ はtによらない実定数である。

[4-6] 突然変化するポテンシャル

次のポテンシャルを考える。

$$V(x) = \begin{cases} \infty & x < 0\\ 0 & 0 \le x \le L \\ \infty & x > L \end{cases} \quad (t \le 0), \quad V(x) = \begin{cases} \infty & x < 0\\ 0 & 0 \le x \le 2L \\ \infty & x > 2L \end{cases} \quad (t > 0) \quad (4-6.1)$$

つまり、t = 0 でポテンシャルを瞬時に変更する。 $t \le 0$ で系が定常状態にあったとき、t > 0 での時間発展を考える。

(a). $t \leq 0$ のポテンシャルでの固有エネルギー $E_n^{(0)}$ と固有関数 $\phi_n^{(0)}(x)$ および、t > 0のポテンシャルでの固有エネルギー E_n と固有関数 $\phi_n(x)$ を求めよ。

(b). $t \leq 0$ で系が基底状態にあるとする。t > 0のときの波動関数は、固有状態 { $|\phi_n\rangle$ } の完全性を用いて

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{n} |\phi_{n}\rangle\langle\phi_{n}|\psi(t)\rangle = \sum_{n} |\phi_{n}\rangle\langle\phi_{n}|\hat{U}(t)|\psi(0)\rangle = \sum_{n} |\phi_{n}\rangle\langle\phi_{n}|\hat{U}(t)|\phi_{1}^{(0)}\rangle$$
(4-6.2)

と書ける。時間発展演算子は状態に作用して

$$\langle \phi_n | \hat{U}(t) | \phi_1^{(0)} \rangle = \int \mathrm{d}x \, \phi_n^*(x) \exp\left(\frac{i\hbar}{2m} \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\right) \phi_1^{(0)}(x) = e^{-iE_1^{(0)}t/\hbar} \langle \phi_n | \phi_1^{(0)} \rangle \tag{4-6.3}$$

となるように思えるが、この式は間違いである。式を修正して正しい表現を得よ。

(c). (b) のとき、t > 0 で状態が $|\phi_n\rangle$ にいる確率を求めよ。

(d). 状態が初期状態に戻る時間周期を求めよ。

$[\mathbf{C}]$

[4-7] 突然加える摂動

調和振動子のハミルトニアンを時間t = 0で突然変化させる(量子クエンチ)。

$$\hat{H}(t) = \begin{cases} \frac{1}{2m}\hat{p}^2 + \frac{m\omega^2}{2}\hat{x}^2 & t < 0\\ \frac{1}{2m}\hat{p}^2 + \frac{m\omega^2}{2}(1+\delta)\hat{x}^2 & t \ge 0 \end{cases}$$
(4-7.1)

 $1 + \delta > 0$ とする。状態がt < 0で基底状態にあったとき、t > 0で時間発展がどのようになるかを調べる。

(a). δ を摂動パラメータとする。 $t \ge 0$ で第 n 励起状態 (n = 1, 2, ...) にいる確率を、摂動の 1 次近似 を用いて求めよ。

(b). t ≥ 0 での運動エネルギーとポテンシャルエネルギーの平均

$$T(t) = \frac{1}{2m} \langle \psi(t) | \hat{p}^2 | \psi(t) \rangle \tag{4-7.2}$$

$$V(t) = \frac{m\omega^2}{2} (1+\delta) \langle \psi(t) | \hat{x}^2 | \psi(t) \rangle$$
(4-7.3)

を、δの1次までの近似でそれぞれ求めよ。

(c). 近似を用いずに*T*(*t*)、*V*(*t*) を求めよ。

[4-8] 撃力

次のハミルトニアンを考える。 t₁ は正の定数を表す。

$$\hat{H}(t) = \hat{H}_0 + \hat{J}\delta(t - t_1) \tag{4-8.1}$$

(a). ハミルトニアンの第2項を相互作用項 $\hat{V}(t)$ とする。相互作用描像の時間発展演算子 $\hat{U}_{\mathrm{I}}(t)$ を求めよ。

(b). 初期時刻 t = 0 での状態を $|\psi\rangle$ としたとき、Schrödinger 描像の状態 $|\psi(t)\rangle$ を求めよ。

(c). \hat{H}_0 の固有状態を $|n\rangle$ (n = 0, 1, ...)とする。 $|\psi\rangle$ が基底状態 $|0\rangle$ であるとき、t > 0 で状態が第 n 励起状態 $|n\rangle$ にいる確率を求めよ。基底状態に縮退はないとする。

(d). (c) の例として次のハミルトニアンを考える。

$$\hat{H}(t) = \frac{1}{2m}\hat{p}^2 + \frac{m\omega^2}{2}\hat{x}^2 - F\hat{x}\delta(t-t_1)$$
(4-8.2)

t > 0 で状態が励起状態にいる確率を求めよ。

(e). (d) のとき、ハミルトニアンの期待値を $t \neq t_1$ で求めよ。

第5章 時間に依存する系

本章では時間に依存するハミルトニアンの系を扱う。前章で摂動近似を用いていくつかの性質を調べた が、ここでは厳密に解ける系や断熱近似など摂動とは異なる手法を用いて時間依存系の特徴や扱い方を議 論する。

5.1 2準位系

もっとも簡単で非自明な量子系である2準位の系を扱う。次の時間依存ハミルトニアンを考える。

$$\hat{H}(t) = \begin{pmatrix} E_1 & \gamma e^{-i\omega t} \\ \gamma e^{i\omega t} & E_2 \end{pmatrix}$$
(5.1)

 $\gamma = 0$ であれば 2 準位の間に相関がなくそれぞれのエネルギーは E_1 、 E_2 と決まるが、 $\gamma \neq 0$ であることに より両準位間に相関が生じる。ここではその相関が時間的に振動している場合を考える。このハミルトニ アンはさまざまな状況で実現する。例えば、スピンに振動する磁場がかかった系という解釈をすることが できる。Zeeman 効果 (Zeeman effect)を利用すると磁場とスピンの相互作用

$$\hat{H} = \boldsymbol{B} \cdot \hat{\boldsymbol{S}} \tag{5.2}$$

が得られる。実験的には、核磁気共鳴(nuclear magnetic resonance, NMR)とよばれる手法を用いて実現 される。また、電場と双極子相互作用をする系でこのようなハミルトニアンが得られる場合もある。より 大きな準位をもつ系でもハミルトニアンの2準位だけを取り出して扱うことによってこの形を得ることも できる。

前節ではγの項を摂動として扱い、両準位間の遷移率を調べた。ここではこのハミルトニアンの Schrödinger 方程式を厳密に解いてその性質を調べよう。状態を

$$|\psi(t)\rangle = \begin{pmatrix} a(t) \\ b(t) \end{pmatrix}$$
(5.3)

とおくと、解くべき方程式は

$$i\hbar \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \begin{pmatrix} a(t) \\ b(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} E_1 & \gamma \mathrm{e}^{-i\omega t} \\ \gamma \mathrm{e}^{i\omega t} & E_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a(t) \\ b(t) \end{pmatrix}$$
(5.4)

である。初期条件を次のように選ぶ。

$$|\psi(0)\rangle = \begin{pmatrix} a(0) \\ b(0) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$
(5.5)

この方程式は基本的な微分方程式の知識があれば解けるので詳細は問題 [5-1] で行ってもらうことにして、 ここでは解を書き下す。

$$|\psi(t)\rangle = \begin{pmatrix} a(t) \\ b(t) \end{pmatrix} = \exp\left(-i\frac{E_1 + E_2}{2\hbar}t\right) \begin{pmatrix} e^{-i\omega t/2}\left(\cos\frac{\tilde{\Omega}t}{2} - i\frac{\Omega}{\tilde{\Omega}}\sin\frac{\tilde{\Omega}t}{2}\right) \\ e^{i\omega t/2}\left(-i\frac{2\gamma}{\hbar\tilde{\Omega}}\sin\frac{\tilde{\Omega}t}{2}\right) \end{pmatrix}$$
(5.6)

ここで次のようなパラメータを用いている。

$$\Omega = \frac{E_1 - E_2}{\hbar} - \omega \tag{5.7}$$

$$\tilde{\Omega} = \sqrt{\Omega^2 + \frac{4\gamma^2}{\hbar^2}} \tag{5.8}$$

 $|a(t)|^2$ が上の準位 1 に時間 t で存在する確率、 $|b(t)|^2$ が下の準位 2 に存在する確率を表している。前者の具体的な表現は

$$p_1(t) = |a(t)|^2 = \cos^2 \frac{\tilde{\Omega}t}{2} + \left(\frac{\Omega}{\tilde{\Omega}}\right)^2 \sin^2 \frac{\tilde{\Omega}t}{2}$$
(5.9)

である。状態が上にいったり下にいったりしていることがわかる。振動の周波数は $\tilde{\Omega}$ である。 $\tilde{\Omega} \ge \Omega$ であることに注意してほしい。 $\tilde{\Omega} > \Omega \neq 0$ のとき、 $p_1(t) < 1$ である。このときは確率1で準位1に存在することはない。 $\Omega = 0$ のとき、

$$p_1(t) = \cos^2 \frac{\gamma t}{\hbar} \tag{5.10}$$

となり、確率 1 で準位 1 に存在する時間と準位 2 に存在する時間が周期的にあらわれる。 $\Omega=0$ の条件が 満たされるのは

$$\omega = (E_1 - E_2)/\hbar \tag{5.11}$$

のときである。つまり、外場の周波数 ω がエネルギー差から決まる周波数 $(E_1 - E_2)/\hbar$ に等しいときに両準位間の遷移を効率的にする。この条件は摂動で考えたときの条件と一致している。Fermiの黄金律の式を見ると無摂動状態のエネルギー差と外場の周波数の \hbar 倍が一致したときに両準位の間で遷移が起こりやすくなる。その結果はここで得た条件と矛盾しないものである。外場の周波数を制御することによって準位間の遷移を起こすことができる。

5.2 断熱近似

5.2.1 断熱状態

前章で扱ったが、ゆっくりと変動する摂動を考えたとき有限の時間に作用する摂動では $t \to \infty$ でその影響は無視できた。問題 [4–5] では \hat{H}_0 から $\hat{H}_0 + \hat{V}$ にゆっくりと変化させた場合 $t \to \infty$ で最終的に得られる 状態は $\hat{H}_0 + \hat{V}$ の固有状態になっていることを摂動的に確かめた。これらの性質は考えてみればもっともな ことである。なぜならゆっくりとハミルトニアンを変化させる場合、短い間にはほぼ定常状態の系とみなせ るから、各時間でハミルトニアンの固有状態になっていると考えられる。ハミルトニアンの時間変化に状態がついていっているわけである。本節ではこのような断熱過程の状態の時間変化を断熱近似 (adiabatic approximation)を用いて調べてみる。

状態は各時間での瞬間固有状態を用いるとよい記述ができると期待される。ハミルトニアンが $\hat{H}(t)$ である系において

$$\hat{H}(t)|n(t)\rangle = E_n(t)|n(t)\rangle \tag{5.12}$$

であるとする。時間 t での固有値を $E_n(t)$ 、固有状態を $|n(t)\rangle$ とする。これらはもちろん時間に依存する。 そして、状態を次のようにおく。

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{n} c_n(t) \mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar} \int_0^t \mathrm{d}t' \, E_n(t')} |n(t)\rangle$$
(5.13)
各時間で固有状態 $\{|n(t)\rangle\}$ が完全系をなすとするとこのように展開すること自体は近似ではない。指数関数の部分は定常状態の時間発展演算子に対応する項であるが、ここではエネルギー固有値が時間に依存するので積分を用いた表現になる。係数 $c_n(t)$ は Schrödinger 方程式を満たすように決められる。代入すると

$$\sum_{n} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{0}^{t} dt' E_{n}(t')} \left(\dot{c}_{n}(t) |n(t)\rangle + c_{n}(t) |\dot{n}(t)\rangle \right) = 0$$
(5.14)

となる。 $\{|n(t)\rangle\}$ が正規直交性を満たすとすると、左から $\langle m(t)|$ をかけて

$$\dot{c}_{m}(t) = -\sum_{n} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{0}^{t} dt' (E_{n}(t') - E_{m}(t'))} c_{n}(t) \langle m(t) | \dot{n}(t) \rangle$$
(5.15a)

$$= -c_m(t)\langle m(t)|\dot{m}(t)\rangle - \sum_{n(\neq m)} e^{-\frac{i}{\hbar}\int_0^t dt' (E_n(t') - E_m(t'))} c_n(t)\langle m(t)|\dot{n}(t)\rangle$$
(5.15b)

となる。この式には固有状態の時間微分というものがあらわれる。固有値方程式 (5.12) を用いると、 $\langle m(t)|\dot{n}(t)\rangle$ の表現を少しわかりやすいものに変形することができる。式 (5.12) を微分して、左から $\langle m(t)|$ をかけると

$$\frac{\partial \dot{H}(t)}{\partial t}|n(t)\rangle + \hat{H}(t)|\dot{n}(t)\rangle = \dot{E}_n(t)|n(t)\rangle + E_n(t)|\dot{n}(t)\rangle$$
(5.16)

$$\langle m(t)|\frac{\partial H(t)}{\partial t}|n(t)\rangle + E_m(t)\langle m(t)|\dot{n}(t)\rangle = \dot{E}_n(t)\delta_{m,n} + E_n(t)\langle m(t)|\dot{n}(t)\rangle$$
(5.17)

となる。これを変形して

$$\langle n(t)|\frac{\partial \dot{H}(t)}{\partial t}|n(t)\rangle = \dot{E}_n(t)$$
(5.18)

$$\frac{\langle m(t)|\frac{\partial H(t)}{\partial t}|n(t)\rangle}{E_n(t) - E_m(t)} = \langle m(t)|\dot{n}(t)\rangle \qquad (m \neq n)$$
(5.19)

となる。この二つめの式を用いると、(5.15)式は

$$\dot{c}_n(t) = -c_n(t)\langle n(t)|\dot{n}(t)\rangle - \sum_{m(\neq n)} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_0^t \mathrm{d}t' \left(E_m(t') - E_n(t')\right)} c_m(t) \frac{\langle n(t)|\frac{\partial \hat{H}(t)}{\partial t}|m(t)\rangle}{E_m(t) - E_n(t)}$$
(5.20)

と書ける。ハミルトニアンが時間によらなければ第2項は0になり、微分方程式を容易に解くことができる。実際、そのときは固有状態も時間によらないから第1項も0となってしまい $c_n(t)$ は時間によらず初期条件のみで決まるという定常状態の結果を得る。

時間依存性を無視できないまでもハミルトニアンがゆっくり変化するとすれば第2項の寄与は小さいは ずである。そのようにして第2項を無視するのが断熱近似である。第1項は無視せず残すとすると

$$c_n(t) = c_n(0) \exp\left(-\int_0^t \mathrm{d}t' \langle n(t') | \dot{n}(t') \rangle\right)$$
(5.21)

となる。つまり、状態は

$$|\psi(t)\rangle \sim \sum_{n} c_{n}(0) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_{0}^{t} \mathrm{d}t' E_{n}(t') - \int_{0}^{t} \mathrm{d}t' \left\langle n(t') | \dot{n}(t') \right\rangle \right) |n(t)\rangle$$
(5.22)

と書ける。右辺の状態を断熱状態 (adiabatic state) とよぶ。

断熱状態は瞬間固有状態の線形結合を用いて書かれている。その係数は時間に依存するが、時間依存性は位相の部分のみにあらわれる。 $\langle n(t)|\dot{n}(t) \rangle$ は純虚数であることに注意してほしい。これは規格化条件 $\langle n(t)|n(t) \rangle = 1$ を時間微分してみるとわかる。

$$\langle n(t)|\dot{n}(t)\rangle + \langle \dot{n}(t)|n(t)\rangle = 0 \tag{5.23}$$

であるが、左辺第2項は第1項の複素共役なので、この式は $\langle n(t)|\dot{n}(t)\rangle$ が純虚数であることを意味している。係数の時間依存性が位相のみにあらわれるということは、その絶対値は定数である。つまり、断熱状



図 5.1: エネルギー固有値の時間発展の例。時間発展を ○ の準位にいる状態からはじめてゆっくり動かす と、断熱状態は一つの準位 (太線) をたどる。縮退の起きる点 ● の付近で断熱近似が破綻して異なる準位 への非断熱遷移が生じる。

態では瞬間固有状態 |n(t)〉にいる確率が時間によらない。固有状態は時間変化するので変化していくのだ が、他の固有状態に遷移することはない。したがって、例えば図 5.1 のようにエネルギー固有値が時間変 化する系で基底状態を初期状態ととったとき、状態は瞬間固有状態をたどるように変化する。これが断熱 過程である。

もちろん、これは近似であるから実際には他の瞬間固有状態への非断熱遷移が起こる。断熱近似がよい 条件は無視した項が小さいとみなせることである。無視した項はハミルトニアンの時間微分を固有状態で はさんだものが分子、2準位のエネルギー差が分母にあらわれる。したがって、ハミルトニアンの時間微分 が小さいだけでなく、エネルギー差が大きいことも近似の成立条件として必要になる。エネルギー準位が 接近しすぎていると非断熱遷移が起こりやすくなるのは直観的にも自然な見方であろう。近似がよい条件 は、考えている状態 n に対して

$$\left|\frac{\langle n(t)|\frac{\partial H(t)}{\partial t}|m(t)\rangle}{(E_m(t) - E_n(t))^2}\right| \ll 1 \qquad m \neq n$$
(5.24)

が成り立てばよいと考えられる。分母が2乗になっているのは左辺の量を無次元量にするために必要である¹。

5.2.2 Berry 位相*

前章でも述べたように、ゆっくりとハミルトニアンが変化する系では瞬間固有状態を展開基底とするの は自然な考え方である。断熱近似では展開係数の絶対値は時間に依存しない。断熱状態は自明な近似に見え るが、ひとつだけ非自明なものがある。 $\langle n(t)|\dot{n}(t) \rangle$ で表される位相項の存在である。位相項にはエネルギー 固有値の時間積分もあらわれるが、これは時間発展演算子に対応するもっともな寄与である。 $\langle n(t)|\dot{n}(t) \rangle$ が 0でないことにより生じる項の直観的な理解は不明である。時間を固定して見たとき位相項は物理的に何の 意味ももたないが、相対的な変化には意味があるから時間に依存する位相項は何らかの物理的な効果をも たらす可能性がある。一般に、 $\langle n(t)|\dot{n}(t) \rangle$ で表される位相項は幾何学的位相(geometric phase)とよばれ ている。さらに、断熱周期過程を考えたときに1周期で生じる幾何学的位相を Berry 位相(Berry phase) とよぶ²。このことを以下では調べてみる。

¹断熱状態がよい条件を厳密に導くことは意外と難しい。もう少し精密な議論もなされているが、ここでは次元解析から近似条件 を書き下すだけにとどめておく。問題 [5-6] の具体例も参照。

²幾何学的位相は断熱過程に限らず一般に定義できるものであり、Berry 位相は断熱周期過程を考えた特別の場合である。ときどき混同して前者を Berry 位相というひとがいるが正確ではない。

議論をわかりやすくするため、次の2準位ハミルトニアンを考える。

$$\hat{H}(t) = \frac{\hbar\omega}{2} \begin{pmatrix} \cos\theta(t) & e^{-i\varphi(t)}\sin\theta(t) \\ e^{i\varphi(t)}\sin\theta(t) & -\cos\theta(t) \end{pmatrix}$$
(5.25)

 ω は正の実数、 $\theta(t)$ と $\varphi(t)$ は実関数であり、 $\theta(t)$ は $0 \le \theta(t) \le \pi$ を満たす。断熱状態を計算するには固有 値方程式を解いて前節で導いた公式を用いればよい。エネルギー固有値は

$$E_n(t) = \left\{\frac{\hbar\omega}{2}, -\frac{\hbar\omega}{2}\right\}$$
(5.26)

となる。ωが時間に依存しても問題はないが、定数の場合と大きな違いは特に生じないためここでは定数のωを考える。対応する二つの状態は

$$|n(t)\rangle = \left\{ \begin{pmatrix} \cos\frac{\theta(t)}{2} \\ e^{i\varphi(t)}\sin\frac{\theta(t)}{2} \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} -e^{-i\varphi(t)}\sin\frac{\theta(t)}{2} \\ \cos\frac{\theta(t)}{2} \end{pmatrix} \right\}$$
(5.27)

と計算できる。よって、断熱状態は次の二つの状態の線形結合(係数は時間によらない)で表される。

$$|n_{\rm ad}(t)\rangle = \begin{cases} \exp\left(-\frac{i\omega t}{2} - i\int_0^t dt' \,\dot{\varphi}(t')\sin^2\frac{\theta(t')}{2}\right) \begin{pmatrix} \cos\frac{\theta(t)}{2} \\ e^{i\varphi(t)}\sin\frac{\theta(t)}{2} \end{pmatrix} \\ \exp\left(\frac{i\omega t}{2} + i\int_0^t dt' \,\dot{\varphi}(t')\sin^2\frac{\theta(t')}{2}\right) \begin{pmatrix} -e^{-i\varphi(t)}\sin\frac{\theta(t)}{2} \\ \cos\frac{\theta(t)}{2} \end{pmatrix} \end{cases}$$
(5.28)

断熱過程を経て状態が元の状態に戻ってくる断熱周期過程を考えてみよう。つまり、 $\theta(T) = \theta(0), \varphi(T) = \varphi(0) + 2\pi$ となるような周期 T がある場合である。このとき、各断熱状態は次のように書ける。

$$|n_{\rm ad}(T)\rangle = \mathrm{e}^{i\gamma_n} \mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar} \int_0^T \mathrm{d}t' \, E_n(t')} |n_{\rm ad}(0)\rangle \tag{5.29}$$

この位相 γ_n が Berry 位相である。 γ_n の表現を求めると、二つの断熱状態で

$$\gamma_n = \mp \frac{1}{2} \int_0^T dt' \, \dot{\varphi}(t') (1 - \cos \theta(t')) \tag{5.30}$$

である。

周期運動の様子は二つの角度 θ 、 φ を用いて表される。これを、単位ベクトル

$$\boldsymbol{n} = (\sin\theta\cos\varphi, \sin\theta\sin\varphi, \cos\theta) \tag{5.31}$$

の運動としてとらえてみよう。周期運動を考えると、ベクトル n は図 5.2 のように単位球面上を 1 周する ものと表現できる。1 周する間に球面をきりとるが、その立体角を Ω としよう。ベクトル n(t)、微小時間 後のベクトル $n(t + \delta t)$ 、z 軸正方向のベクトル (0,0,1) によって囲まれる微小領域の立体角は

$$\delta\Omega = \int_0^{\theta(t)} \mathrm{d}\theta' \sin\theta' \int_{\varphi(t)}^{\varphi(t+\delta t)} \mathrm{d}\varphi = (1-\cos\theta(t))\dot{\varphi}(t)\delta t$$
(5.32)

と書ける。つまり、周期運動で得られる立体角は

$$\Omega = \int_0^T dt' \,\dot{\varphi}(t') (1 - \cos\theta(t')) \tag{5.33}$$

と書け、Berry 位相は立体角に比例している³。

$$\gamma_n = \mp \frac{1}{2}\Omega \tag{5.34}$$

これが Berry 位相が幾何学的位相とよばれる理由である。経路がつくる立体角で決まり、どのように経路 をたどってきたかには依存しない。

 $^{^3}$ ここの計算ではわからないが、係数 1/2 はスピン 1/2 を表している。2 準位の系はスピン 1/2 を表す。



図 5.2: 単位ベクトルの球面上の運動。ベクトルの軌跡が球面上に閉軌道をつくり、立体角Ωが定義される。

また、Berry 位相は以下のように書くこともできる。状態の時間依存性はパラメータ R の時間変化を通してあらわれるから、固有状態を

$$|n(t)\rangle \to |n(\mathbf{R}(t))\rangle$$
 (5.35)

と書く。上の例では $\mathbf{R}(t)$ は 3 次元ベクトルであり、 $\mathbf{R}(t) = \omega(\sin \theta(t) \cos \varphi(t), \sin \theta(t) \sin \varphi(t), \cos \theta(t))$ と書くことができる。このとき、Berry 位相の表現は

$$\gamma_n = i \int_{\boldsymbol{R}(0)}^{\boldsymbol{R}(T)} \mathrm{d}\boldsymbol{R} \cdot \langle n(\boldsymbol{R}) | \boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{R}} | n(\boldsymbol{R}) \rangle$$
(5.36)

である。ベクトルがR(0)からR(T)まで動くが、今考えている周期運動の場合、R(T) = R(0)である。 よって、積分は閉軌道 C 上の線積分となり、

$$\gamma_n = \oint_{c} d\mathbf{R} \cdot \mathbf{A}_n(\mathbf{R})$$
(5.37)

の形に書くことができる。 $A_n(R)$ はパラメータ空間上で定義された「ベクトルポテンシャル」とみなされる量である。パラメータ空間が 3 次元であれば Stokes の定理を用いて

$$\gamma_n = \oint_{\mathbf{S}} \mathrm{d}\boldsymbol{R} \cdot \boldsymbol{\nabla} \times \boldsymbol{A}_n(\boldsymbol{R}) \tag{5.38}$$

書くことができる。 $\mathbf{
abla} imes \mathbf{A}_n(\mathbf{R})$ はベクトルポテンシャルから定義される「磁場」を表し、Berry 位相は閉 軌道 C がつくる面 S を貫く流束と解釈することができる。

Berry 位相は実際に測定することができる⁴。状態にかかる位相は幾何学的位相と動的位相とよばれる時 間発展演算子に起因する項との和で表されるので、幾何学的位相を考慮するには動的位相の寄与が生じな い系を考えるのが望ましい。そのため、実際に Berry 位相を捉えるのは厄介であるが、現在では複数の方 法を用いて測定されている。

5.3 STIRAP*

2準位系では振動外場をかけることによって二つの準位間をいったりきたりする遷移が可能であること をみた。ここではもう少し複雑な例として3準位の系である誘導 Raman 断熱遷移(stimulated Raman adiabatic passage, STIRAP)の問題を具体的な応用例として考える。これは断熱近似の応用例ともなっ ている。





図 5.4: $\Omega_1(t)$ 、 $\Omega_2(t)$ と状態 3 の存在確率の時間依存性。 $\Omega_1(t)$ 、 $\Omega_2(t)$ は適当に無次元化している。

 $\epsilon_2 - \epsilon_1 = \hbar\omega_1 + \Delta$ 、2 と 3 のエネルギー差を $\epsilon_2 - \epsilon_3 = \hbar\omega_2 + \Delta$ とする。

図 5.3: 3 準位の系。1 と 2 のエネルギー差を

三つの準位があり、ハミルトニアンを

$$\hat{H}_{0} = \begin{pmatrix} \epsilon_{1} & 0 & 0\\ 0 & \epsilon_{2} & 0\\ 0 & 0 & \epsilon_{3} \end{pmatrix}$$
(5.39)

と書く。エネルギー固有値は図 5.3 のように $\epsilon_2 > \epsilon_3 > \epsilon_1$ としておくが、並び方を変えても以下の議論は 適用できるので一般性を失うわけではない。ここでの目的は外場をかけることによって状態1にいる状態 を状態3に遷移させることである。外場として電場をかけると、系がもつ双極子モーメントの存在によっ て相互作用を行う。ここでは、次のような相互作用を考える。

$$\hat{V}(t) = \begin{pmatrix} 0 & \boldsymbol{d}_1 \cdot \boldsymbol{E}(t) & 0 \\ \boldsymbol{d}_1^* \cdot \boldsymbol{E}(t) & 0 & \boldsymbol{d}_3 \cdot \boldsymbol{E}(t) \\ 0 & \boldsymbol{d}_3^* \cdot \boldsymbol{E}(t) & 0 \end{pmatrix}$$
(5.40)

つまり、状態1と2、2と3の間にそれぞれ相互作用が働く。1と3の間に直接の相互作用は働いていない。 2を媒介して1から3に遷移させるのが問題である。電場を次のようにとる。

$$\boldsymbol{E}(t) = \boldsymbol{E}_1(t)\mathrm{e}^{i\omega_1 t} + \boldsymbol{E}_2(t)\mathrm{e}^{i\omega_2 t} + \mathrm{c.c.}$$
(5.41)

おおまかに言って、第1項は周波数 ω_1 、第2項は ω_2 で振動する。ベクトル $E_1(t)$ 、 $E_2(t)$ は時間に依存す る関数であり、 ω_1 、 ω_2 の振動よりゆっくりと変化するものとする。この周波数を差がエネルギー準位1と 2の差の \hbar 倍になるように調節して次のようにする。

$$\epsilon_1 = 0 \tag{5.42}$$

$$\epsilon_2 = \hbar\omega_1 + \Delta \tag{5.43}$$

$$\epsilon_3 = \hbar(\omega_1 - \omega_2) \tag{5.44}$$

図 5.3 を参照。エネルギーの基準はどのようにとってもよいので $\epsilon_1 = 0$ とした。このとき、状態を

$$|\psi(t)\rangle = c_1(t)|1\rangle + c_2(t)|2\rangle + c_3(t)|3\rangle = \begin{pmatrix} c_1(t) \\ c_2(t) \\ c_3(t) \end{pmatrix}$$
(5.45)

 $^{^4}$ 絶対的な位相は原理的に測定できないが、 Berry 位相は1周期の相対的な位相変化分を表すから測定は可能である。

とおくと、時間依存 Schrödinger 方程式は

$$i\hbar \begin{pmatrix} \dot{c}_1(t) \\ \dot{c}_2(t) \\ \dot{c}_3(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \epsilon_1 & \boldsymbol{d}_1 \cdot \boldsymbol{E}(t) & \boldsymbol{0} \\ \boldsymbol{d}_1^* \cdot \boldsymbol{E}(t) & \epsilon_2 & \boldsymbol{d}_3 \cdot \boldsymbol{E}(t) \\ \boldsymbol{0} & \boldsymbol{d}_3^* \cdot \boldsymbol{E}(t) & \epsilon_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1(t) \\ c_2(t) \\ c_3(t) \end{pmatrix}$$
(5.46)

と書ける。

ここで次のユニタリー変換を行う。

$$\begin{pmatrix} c_1(t) \\ c_2(t) \\ c_3(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{-i\phi_1(t)} & 0 & 0 \\ 0 & e^{-i\phi_1(t)} & 0 \\ 0 & 0 & e^{-i\phi_1(t)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{c}_1(t) \\ \tilde{c}_2(t) \\ \tilde{c}_3(t) \end{pmatrix}$$
(5.47)

対角行列による変換であるから、変換によって準位がまざることはない。位相が変化するだけである。このとき

$$i\hbar \begin{pmatrix} \dot{\tilde{c}}_1(t) \\ \dot{\tilde{c}}_2(t) \\ \dot{\tilde{c}}_3(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \epsilon_1 - \hbar\dot{\phi}_1(t) & \boldsymbol{d}_1 \cdot \boldsymbol{E}(t) \mathrm{e}^{i\phi_{12}(t)} & \boldsymbol{0} \\ \boldsymbol{d}_1^* \cdot \boldsymbol{E}(t) \mathrm{e}^{-i\phi_{12}(t)} & \epsilon_2 - \hbar\dot{\phi}_2(t) & \boldsymbol{d}_3 \cdot \boldsymbol{E}(t) \mathrm{e}^{i\phi_{23}(t)} \\ \boldsymbol{0} & \boldsymbol{d}_3^* \cdot \boldsymbol{E}(t) \mathrm{e}^{-i\phi_{23}(t)} & \epsilon_3 - \hbar\dot{\phi}_3(t) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{c}_1(t) \\ \tilde{c}_2(t) \\ \tilde{c}_3(t) \end{pmatrix}$$
(5.48)

である。 $\phi_{12} = \phi_1 - \phi_2$ などとした。位相の選択は完全に任意であるが次のようにとる。

$$\phi_1(t) = 0 \tag{5.49}$$

$$\phi_2(t) = \omega_1 t \tag{5.50}$$

$$\phi_3(t) = (\omega_1 - \omega_2)t \tag{5.51}$$

このとき、電場の項はそれぞれ

$$\boldsymbol{d}_{1} \cdot \boldsymbol{E}(t) \mathrm{e}^{i\phi_{12}(t)} = \boldsymbol{d}_{1} \cdot \left(\boldsymbol{E}_{1}(t) + \boldsymbol{E}_{1}^{*}(t) \mathrm{e}^{-2i\omega_{1}t} + \boldsymbol{E}_{2}(t) \mathrm{e}^{-i(\omega_{1}-\omega_{2})t} + \boldsymbol{E}_{2}^{*}(t) \mathrm{e}^{-i(\omega_{1}+\omega_{2})t} \right) \quad (5.52)$$

$$\boldsymbol{d}_{3} \cdot \boldsymbol{E}(t) \mathrm{e}^{i\phi_{23}(t)} = \boldsymbol{d}_{3} \cdot \left(\boldsymbol{E}_{1}(t) \mathrm{e}^{i(\omega_{1}+\omega_{2})t} + \boldsymbol{E}_{1}^{*}(t) \mathrm{e}^{-i(\omega_{1}-\omega_{2})t} + \boldsymbol{E}_{2}(t) \mathrm{e}^{2i\omega_{2}t} + \boldsymbol{E}_{2}^{*}(t) \right)$$
(5.53)

のように書ける。各項は $\omega_1 \ge \omega_2$ を組み合わせた周波数で振動するが、周波数のスケールが観測する時間 で決まるスケールと比較して十分大きいとしよう。このとき、速く振動する項は無視できるとする。これ を回転波近似 (rotating-wave approximation) という。主要な寄与は、周波数が打ち消し合って振動しな い項のみとなり、次のようになる。

$$\boldsymbol{d}_1 \cdot \boldsymbol{E}(t) \mathrm{e}^{i\phi_{12}(t)} \sim \boldsymbol{d}_1 \cdot \boldsymbol{E}_1(t) \tag{5.54}$$

$$\boldsymbol{d}_3 \cdot \boldsymbol{E}(t) \mathrm{e}^{i\phi_{23}(t)} \sim \boldsymbol{d}_3 \cdot \boldsymbol{E}_2^*(t) \tag{5.55}$$

よって、Schrödinger 方程式

$$i\hbar \begin{pmatrix} \dot{\tilde{c}}_1(t) \\ \dot{\tilde{c}}_2(t) \\ \dot{\tilde{c}}_3(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \boldsymbol{d}_1 \cdot \boldsymbol{E}_1(t) & 0 \\ \boldsymbol{d}_1^* \cdot \boldsymbol{E}_1^*(t) & \Delta & \boldsymbol{d}_3 \cdot \boldsymbol{E}_2^*(t) \\ 0 & \boldsymbol{d}_3^* \cdot \boldsymbol{E}_2(t) & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{c}_1(t) \\ \tilde{c}_2(t) \\ \tilde{c}_3(t) \end{pmatrix}$$
(5.56)

を得る。ここで簡単のために、 $d_1 \cdot E_1(t)$ および $d_3 \cdot E_2(t)$ が実数であるとする。これらは時間について ゆっくりと変動する関数である。得られた方程式は

$$i\hbar \begin{pmatrix} \dot{\tilde{c}}_1(t) \\ \dot{\tilde{c}}_2(t) \\ \dot{\tilde{c}}_3(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \Omega_1(t) & 0 \\ \Omega_1(t) & \Delta & \Omega_2(t) \\ 0 & \Omega_2(t) & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{c}_1(t) \\ \tilde{c}_2(t) \\ \tilde{c}_3(t) \end{pmatrix}$$
(5.57)

という形に書ける。

右辺にあらわれるハミルトニアン行列の各行列要素は時間についてゆっくりと変動する関数であるので、 断熱近似を用いて考えることができる。断熱近似を用いるには固有値方程式を考えればよい。固有値・固 有状態はそれぞれ3つ存在するが、ここではそのうちの一つであるゼロ固有値の状態に注目する。固有状 態は

$$|\phi_1(t)\rangle = \begin{pmatrix} \cos\theta(t) \\ 0 \\ -\sin\theta(t) \end{pmatrix}$$
(5.58)

と書ける。ここで二つの関数 $\Omega_1(t)$ 、 $\Omega_2(t)$ で決まる角度を次のように定義した。

$$\tan\theta(t) = \frac{\Omega_1(t)}{\Omega_2(t)} \tag{5.59}$$

エネルギーは0であるし幾何学的位相も0なので、これがそのまま断熱状態を与える5。

この状態の特徴は準位 2 の状態を含んでいないことである。任意の時間で準位 2 の状態に存在する確率 は 0 である。このため、準位 2 の状態は dark state とよばれている。電場をかけても状態 2 に遷移するこ とはないが、関数 $\Omega_1(t) \ge \Omega_2(t)$ にしたがって状態 1 と 3 の間の遷移を起こすことができる。 $\theta = 0$ とすれ ば状態 1 の存在確率が 1 になるし、 $\theta = \pi/2$ では状態 3 の存在確率が 1 となる。時間 t で状態 3 に存在す る確率は

$$\langle 3|\psi(t)\rangle|^2 \sim |\langle 3|\phi_1(t)\rangle|^2 = \sin^2\theta(t) = \frac{\Omega_1^2(t)}{\Omega_1^2(t) + \Omega_2^2(t)}$$
(5.60)

と書ける。状態1と3の間の相互作用は存在しないが状態2との相互作用を利用することによって1と3 の間の遷移を起こすことができる。しかもその場合でも途中の時間で状態2に遷移することはない。また、 準位2のエネルギーを特徴づけるパラメータ△の依存性も全くないことに注意してほしい。遷移を引き起 こすためには準位2が必要であることは明らかであるが、その依存性が一切ないように見える。

図 5.4 は、適当な $\Omega_1(t) \ge \Omega_2(t)$ を与えたときに状態が準位 3 へ移っていく様子を示している。これも直 感に反する結果である。「古典的」に考えると 1 と 2 の間の相互作用をいれてまず 2 に遷移させてそれから 2 と 3 の間の遷移を起こすというのが自然な考え方であろう。ところが、上の結果は 1 と 2 より前に 2 と 3 の相互作用をいれるべきであることを示している。

5.4 時間周期系*

空間的に周期性をもつポテンシャルの系では Bloch の定理が知られており、波動関数をある形におくこ とができた。同様に時間周期性をもつハミルトニアンを考えたとき、類似の公式が成り立つことを期待す るのは自然であろう。本節では時間周期性をもつ系の一般的な性質を調べる。時間周期性をもつとは、ハ ミルトニアンが次の性質を満たすことを意味する。

$$\hat{H}(t+T) = \hat{H}(t) \tag{5.61}$$

Tが周期を表す。このとき状態もある種の周期性をもっていることが期待される。

次の方程式を考える。

$$\left(\hat{H}(t) - i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\right)|n(t)\rangle = \epsilon_n|n(t)\rangle$$
(5.62)

右辺の ϵ_n は時間によらない定数である。つまり、この方程式は演算子 $\hat{H}(t) - i\hbar\partial_t$ に対する固有値方程式 を表している。 $i\hbar\partial_t$ をエルミート演算子と考えれば固有値 ϵ_n は実数となる。これは運動量演算子の座標表 示 $-i\hbar\partial_x$ がエルミートであることから自然に思える。ただし、運動量演算子のエルミート性は、周期境界

⁵各項に適当な位相をつけて最初の基底を用いた状態に戻す必要があるが、以下の議論には影響ないので考えない。

条件等、境界条件を適切に選ぶことにより示されていた。エルミート性の条件は空間積分で表され、部分 積分を行ったことを思い出そう。時間微分演算子の場合、任意の時間では周期性をもたないし、そもそも 内積の定義に時間積分を用いないから部分積分を行うことができない。*i*れ∂_tのエルミート性を示すには内 積を時間積分を含めて定義するなど工夫が必要となる⁶。

さて、求まると期待される固有関数系 $\{|n(t)\rangle\}$ を用いて Schrödinger 方程式の解を

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{n} c_n(t)|n(t)\rangle \tag{5.63}$$

と展開する。これは固有関数系が完全性を満たせば可能な展開である。このとき、

$$0 = \left(\hat{H}(t) - i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\right)|\psi(t)\rangle = \sum_{n} \left(\epsilon_{n}c_{n}(t) - i\hbar\dot{c}_{n}(t)\right)|n(t)\rangle$$
(5.64)

より、

$$i\hbar\dot{c}_n(t) = \epsilon_n c_n(t) \tag{5.65a}$$

$$c_n(t) = c_n(0) \mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}\epsilon_n t} \tag{5.65b}$$

と解ける。よって、状態は断熱近似と同じように絶対値が時間によらない係数を用いた線形結合

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{n} c_n(0) \mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}\epsilon_n t} |n(t)\rangle$$
(5.66)

で書ける。初期時刻で $|n(0)\rangle$ の状態であった場合、任意の時間で状態は同じ固有状態 $|n(t)\rangle$ にいる。

ここまでハミルトニアンの周期性は全く用いていない。周期性を課すと状態 $|n(t)\rangle$ について何らかの性質を導くことができるだろう。 $\hat{H}(t)=\hat{H}(t+T)$ である場合、

$$\epsilon_n |n(t+T)\rangle = \left(\hat{H}(t+T) - i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\right) |n(t+T)\rangle = \left(\hat{H}(t) - i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\right) |n(t+T)\rangle$$
(5.67)

であるから固有値に縮退がないとすると $|n(t+T)\rangle$ は $|n(t)\rangle$ と同じ状態であるはずである。位相のずれは許されるから

$$|n(t+T)\rangle = e^{i\theta_n(T)}|n(t)\rangle$$
(5.68)

と書ける。任意の整数 k について

$$|n(t+kT)\rangle = e^{i\theta_n(kT)}|n(t)\rangle = e^{ik\theta_n(T)}|n(t)\rangle$$
(5.69)

であるから、 $\theta_n(T)$ はTに比例することがわかる。 $\theta_n(T) = \alpha_n T$ とおいて

$$|n(t+T)\rangle = e^{i\alpha_n T}|n(t)\rangle$$
(5.70)

と書ける。さらに、

$$|n(t)\rangle = e^{i\alpha_n t} |\tilde{n}(t)\rangle \tag{5.71}$$

とおくと、状態 $|\tilde{n}(t)\rangle$ は時間周期 T の並進について不変である。

$$|\tilde{n}(t+T)\rangle = |\tilde{n}(t)\rangle \tag{5.72}$$

以上をまとめると、時間周期性をもつハミルトニアンに対する Schrödinger 方程式の解は

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{n} c_n(0) \mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}\epsilon_n t + i\alpha_n t} |\tilde{n}(t)\rangle$$
(5.73)

⁶Hilbert 空間を拡大するという解釈ができる。詳しくはたとえば次の文献を参照。

D. J. Tannor, "Introduction to Quantum Mechanics: A Time-Dependent Perspective" University Science Books 2007 \boxplus

と書ける。 α_n は時間によらない定数、 $|\tilde{n}(t)\rangle$ は (5.72) 式の周期性をもつ状態である。 $|\tilde{n}(t)\rangle$ は周期性をもつが、 $|\psi(t)\rangle$ は一般に周期性をもたないことに注意されたい。この結果を Bloch の定理と比較してみると当然であるがよく似ていることがわかる。

演算子 $\hat{H}(t) - i\hbar\partial_t$ は Floquet 演算子 (Floquet operator) とよばれる⁷。このようにして時間周期のある系に成り立つ性質は Floquet の定理 (Floquet theorem) に基づいている。量子力学と関係なく考えられた定理である⁸

⁷Floquet はフランス人であり、「ふろけ」と発音する。

⁸1883 年、まだ量子力学がない時代の定理である。量子力学への適用は、1965 年 Shirley による。

5.5 問題

 $[\mathbf{A}]$

[5-1] 2 準位系

Schrödinger 方程式 (5.1) を任意の初期条件で解け。

[5-2] 断熱状態

 $\hat{H}(t)$ の固有状態は位相についての任意性をもつ。つまり、 $|n(t)\rangle$ の代わりに次の状態を用いることもできる。

$$|\tilde{n}(t)\rangle = e^{i\theta_n(t)}|n(t)\rangle \tag{5-2.1}$$

 $\theta_n(t)$ は $\theta_n(0) = 0$ を満たす任意実関数である。このとき、断熱状態 (5.22) 式はこの位相変換に対して不変であることを示せ。

[5-3] Berry 位相

第 5.1 節の 2 準位系の例において、2 つの断熱状態に対して Berry 位相 γ_n を求めよ。

[5-4] 時間周期系

第5.1節の2準位系の例において、(5.73)式の表現がどのように対応しているか調べよ。

$[\mathbf{B}]$

[5-5] 動的不変量

ハミルトニアンが $\hat{H}(t)$ で与えられる系において、次の式を満たす時間依存エルミート演算子 $\hat{I}(t)$ を考える。

$$i\hbar \frac{\partial \hat{I}(t)}{\partial t} = [\hat{H}(t), \hat{I}(t)]$$
 (5-5.1)

これは動的不変量 (dynamical invariant) あるいは Lewis-Riesenfeld 不変量 (Lewis-Riesenfeld invariant) とよばれる。

(a). Schrödinger 方程式を満たす状態 $|\psi(t)\rangle$ についての期待値 $\langle \psi(t) | \hat{I}(t) | \psi(t) \rangle$ が時間に依存しないことを示せ。

(b). 演算子 $\hat{I}(t)$ の各時間での規格化された固有状態 |n(t)
angle を考える。固有値 λ_n が時間に依存しないことを示せ。

$$\hat{I}(t)|n(t)\rangle = \lambda_n|n(t)\rangle$$
 (5-5.2)

(c). { $|n(t)\rangle$ } は正規直交・完全性をもち、固有値に縮退はないとする。ハミルトニアンが次のように書けることを示せ。 $E_n(t)$ は実関数を表す。

$$\hat{H}(t) = \sum_{n} E_{n}(t)|n(t)\rangle\langle n(t)| + i\hbar \sum_{\substack{m,n\\(m\neq n)}} |m(t)\rangle\langle m(t)|\dot{n}(t)\rangle\langle n(t)|$$
(5-5.3)

(d). $|\psi(t)\rangle$ を $\hat{I}(t)$ の固有状態で展開する。

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{n} c_n \mathrm{e}^{i\alpha_n(t)} |n(t)\rangle \tag{5-5.4}$$

実数 c_n が時間に依存しないことを示せ。また、実数 $\alpha_n(t)$ の表式を求めよ。

[5-6] Landau-Zener 遷移

次のスピンハミルトニアンを断熱近似を用いて扱う。

$$\hat{H}(t) = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} vt & \Delta \\ \Delta & -vt \end{pmatrix}$$
(5-6.1)

(a). 2 つの各準位に対して断熱状態を求めよ。また、 $\hat{H}(t)$ の固有値を時間の関数として図示せよ。

(b). 初期時刻 $t = -\infty$ でスピン演算子 $\hat{S}_z = \frac{\hbar}{2}\hat{\sigma}_z$ の固有値が $-\frac{\hbar}{2}$ となる断熱状態について、固有値が $+\frac{\hbar}{2}$ となる確率を時間の関数として求め、図示せよ。

(c). ハミルトニアンを次のように対角化するユニタリー演算子 $\hat{U}(t)$ を求めよ。

$$\hat{H}_0(t) = \hat{U}(t)\hat{H}(t)\hat{U}^{\dagger}(t)$$
(5-6.2)

(d). 状態 |ψ(t)〉に対してユニタリー変換を行う。

$$|\hat{\psi}(t)\rangle = \hat{U}(t)|\psi(t)\rangle \tag{5-6.3}$$

このとき、Schrödinger 方程式は次のように書ける。

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\tilde{\psi}(t)\rangle = (\hat{H}_0(t) + \hat{H}_1(t))|\tilde{\psi}(t)\rangle$$
(5-6.4)

演算子 $\hat{H}_0(t)$ および $\hat{H}_1(t)$ を求めよ。断熱近似がよい条件は、前者の固有値の大きさが後者の固有値の大きさと比較して非常に大きいことである。その条件から断熱近似がよい条件を Δ と v を用いて表せ。

[5-7] 量子速度限界

ハミルトニアン $\hat{H}(t)$ の Schrödinger 方程式にしたがう規格化された状態 $|\psi(t)\rangle$ について考える。初期時 刻 t = 0 での状態を $|\psi\rangle$ として、時間 t での状態との内積を次のように定義する。

$$F(t) = \langle \psi | \psi(t) \rangle \tag{5-7.1}$$

(a). $t = \Delta t$ の微小時間のとき、次のように書く。

$$|F(\Delta t)|^2 = 1 - v^2 \Delta t^2 + O(v^3 \Delta t^3)$$
(5-7.2)

vの表式を求めよ。

(b). 次の式を示せ。

$$i\hbar \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} |F(t)|^2 = \Delta E(t) \Big(\langle \psi | \psi^{\perp}(t) \rangle F^*(t) - \langle \psi^{\perp}(t) | \psi \rangle F(t) \Big)$$
(5-7.3)

 $\Delta E(t)$ は $\sqrt{\langle \psi(t) | \hat{H}^2(t) | \psi(t) \rangle} - \langle \psi(t) | \hat{H}(t) | \psi(t) \rangle^2$ を表し、 $| \psi^{\perp}(t) \rangle$ は、(2-9.1)式(40ページ)で \hat{V} を $\hat{H}(t)$ 、 $| \psi \rangle$ を $| \psi(t) \rangle$ としたときに定義される、 $| \psi(t) \rangle$ に直交する状態である。

(c). $|\psi\rangle$ を次のようにおいて $|\tilde{\psi}(t)\rangle$ を定義する。

$$|\psi\rangle = |\psi(t)\rangle\langle\psi(t)|\psi\rangle + |\psi^{\perp}(t)\rangle\langle\psi^{\perp}(t)|\psi\rangle + |\tilde{\psi}(t)\rangle$$
(5-7.4)

このとき、次の不等式を示し、等号は $|\tilde{\psi}(t)
angle = 0$ のときに成り立つことを示せ。

$$|\langle \psi | \psi^{\perp}(t) \rangle|^2 \le 1 - |F(t)|^2 \tag{5-7.5}$$

(d). $|F(t)|^2 = 1 - \sin^2 \theta_{\rm D}(t)$ によって $\theta_{\rm D}(t)$ を定義する。 $0 \le \theta_{\rm D}(t) \le \frac{\pi}{2}$ である。このとき、次の Mandelstam–Tamm 不等式 (Mandelstam–Tamm inequality) を示せ。

$$\theta_{\rm D}(t) \le \int_0^t \mathrm{d}t' \, \frac{\Delta E(t')}{\hbar} \tag{5-7.6}$$

等号はどのようなときに成り立つか。

 $[\mathbf{C}]$

[5-8]時間依存箱型ポテンシャル

 $0 < x < \xi(t)$ の領域に閉じ込められた1次元1粒子系を考える。 $\xi(t)$ は正の関数を表す。この系で次の動的不変量が存在するとする。

$$\hat{I}(t) = \frac{1}{2m} \left(\frac{\xi(t)}{\xi(0)}\right)^2 \left(\hat{p} - m\frac{\dot{\xi}(t)}{\xi(t)}\hat{x}\right)^2$$
(5-8.1)

ハミルトニアンは $0 < x < \xi(t)$ で次の形をもつ。

$$\hat{H}(t) = \frac{1}{2m}\hat{p}^2 + U(\hat{x}, t)$$
(5-8.2)

このとき、ポテンシャル U(x,t) と、 $\hat{I}(t)$ の固有値 λ_n 、固有波動関数 $\psi_n(x,t) = \langle x | n(t) \rangle$ を求めよ。境界 条件は $\psi_n(0,t) = \psi_n(\xi(t),t) = 0$ である。

第6章 变分法

変分法は、変分原理のように基礎方程式の導出にも用いられるが、摂動と並ぶ代表的な近似手法でもあ る。摂動と比べると系統性は劣るが、汎用性は高い。どのような変分関数を試行するかには任意性があり、 結果も試行関数によって変わるため、物理的(?)センスを要求される方法でもある。変分法は、多体問題 を扱うときに特に便利な方法となる。多体系を解析する標準的な手法である平均場近似は変分法の一種で ある。

6.1 変分原理

6.1.1 一般論

前章では時間に依存する系を扱ったが、ここから再び基本的な定常系の問題に戻る。量子力学の中心的 な課題は固有値方程式を解くことであった。固有値方程式を解くことは一般に難しく、系統的な近似方法 は摂動展開くらいしか知られていない。摂動展開も万能な方法ではなく、縮退のある系では計算が煩雑に なるし、そもそも展開ができない場合もある。

ここでは摂動とは全く異なる考え方を用いてエネルギー準位や状態を求める。決して系統的な方法では ないが、うまくいくときは摂動展開の方法よりはるかによい定量的な結果を出す方法である。波動関数を 適当なものに限定して、最適化を行う。

エネルギー固有値が離散的な定常束縛状態を考える。ハミルトニアンを Ĥ としたとき、系のとりうる固 有エネルギーは固有値方程式を解いて求まる。

$$\hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle \tag{6.1}$$

固有値方程式を満たす状態をみつけるのは一般に至難の業である。そこで状態を適当なものに仮定する。その近似状態を $|\psi_0\rangle$ とすると、これは固有値方程式を満たしているとは限らない。そこで、このときのエネルギーを期待値で見積もる。

$$\bar{E}_0 = \langle \psi_0 | \hat{H} | \psi_0 \rangle \tag{6.2}$$

 $|\psi_0\rangle$ は規格化条件 $\langle\psi_0|\psi_0
angle=1$ を満たすとしている。固有値方程式を解いて求まる固有状態 $\{|n
angle\}$ が完全性をもつとすると近似状態は

$$|\psi_0\rangle = \sum_n |n\rangle \langle n|\psi_0\rangle \tag{6.3}$$

と展開できる。これが真の基底状態であれば $\langle n|\psi_0\rangle = \delta_{n,0}$ となるのだが、それ以外の場合には $\langle n|\psi_0\rangle$ は いろいろな $n \subset 0$ でない値をとる。これを用いて基底状態のエネルギーは

$$\bar{E}_0 = \sum_n E_n |\langle n|\psi_0\rangle|^2 \tag{6.4}$$

と書ける。

 $|\psi_0\rangle$ を定める原理は存在しないが、どのように $|\psi_0\rangle$ を選ぼうとも求めたエネルギーが基底状態のエネル ギーより小さくなることはない。

$$\bar{E}_0 \ge E_0 \tag{6.5}$$

この関係式を導くには次の変形を用いればよい。

$$\bar{E}_0 - E_0 = \sum_n E_n |\langle n | \psi_0 \rangle|^2 - E_0 = \sum_n (E_n - E_0) |\langle n | \psi_0 \rangle|^2 \ge 0$$
(6.6)

 $\sum_n |\langle n|\psi_0
angle|^2 = 1$ であることを用いている。

変分法の原理は以上である。この原理を利用して次のように基底状態を見積もる。

- (i) 基底状態として適当な状態 $|\psi_0(\lambda)\rangle$ を仮定する。状態には適当なパラメータ λ を含めておく。パラ メータは一般に複数個ある。
- (ii) エネルギー期待値 $\bar{E}_0(\lambda) = \langle \psi_0(\lambda) | \hat{H} | \psi_0(\lambda) \rangle$ を計算する。

(iii) *Ē*₀ をパラメータについて最小化する。

$$\bar{E}_0 = \min_{\lambda} \bar{E}_0(\lambda) \tag{6.7}$$

そしてこの値 \overline{E}_0 をエネルギー固有値 E_0 の近似値とする。基底状態は $|\psi_0\rangle = |\psi_0(\lambda_{\min})\rangle$ と近似される。 λ_{\min} は $\overline{E}_0(\lambda)$ が最小となる λ である。

このように、適度な自由度をもたせた状態 $|\psi_0(\lambda)\rangle$ を仮定して、その範囲で \bar{E}_0 がなるべく小さくなるようにパラメータを決めてやればよい。とにかく小さくすればよいことは上で述べた定理から保証されている。あらゆる可能性の中でもっともエネルギーを小さくすることができればそれが基底エネルギーの厳密値になるのだが、一般にそれを行うことは不可能である。そこで、限定された範囲内で最小化を行う。これが変分法のポイントである。また、状態を固有状態にとらないで計算することも解析を容易にしている。簡単な関数を仮定したりパラメータの数が少なければ具体的に計算を行うことができるようになるが、一般に簡単な関数ほど厳密解に近づけることが難しい。複雑になると厳密値に近づく可能性が増えるが、計算は複雑になる。したがって、本章冒頭で述べたように、試行関数の選択にセンスが要求される。

試行関数を決める指導原理が何も無いのが変分法の問題点であるが、その分自由度は高い。問題に応じ て適切と思われる関数形を仮定すればよい。系のもつ対称性を反映させることはまず考えるべきである。例 えば、1次元偶関数ポテンシャルの系において基底状態波動関数は偶関数となるから変分関数も偶関数に すべきである。このような基本対称性を反映させた変分関数を仮定するとよいだろう。

6.1.2 例

例として水素原子の基底状態を考える。この系は厳密に解かれている。詳しくは第1章にまとめたが、 動径変数の波動関数は基底状態では

$$R_{1\,0}(r) \propto e^{-2r/a_{\rm B}}$$
 (6.8)

となる。これの代わりにわざと異なる関数形を仮定して問題を解いてみる。次のようにおく。

$$R(r) = A \mathrm{e}^{-\lambda r^2/2} \tag{6.9}$$

つまり Gauss 型の関数である。正定数 λ を変分法を用いて決める。係数 A は規格化条件の式

$$\int_{0}^{\infty} r^{2} \mathrm{d}r \, R^{2}(r) = 1 \tag{6.10}$$

を解くことによって求まる。

$$R(r) = \left(\frac{16\lambda^3}{\pi}\right)^{1/4} e^{-\lambda r^2/2}$$
(6.11)

基底状態のエネルギーはこの波動関数について (1.79) 式 (17 ページ) にあらわれる演算子の期待値をとることによって近似される。計算を行うと次のようになる。

$$\bar{E}(\lambda) = \frac{3\hbar^2}{4m}\lambda - \frac{e^2}{2\pi\epsilon_0} \left(\frac{\lambda}{\pi}\right)^{1/2}$$
(6.12)

ここまで定数 λ は任意であった。 $\bar{E}(\lambda)$ がなるべく小さい値をとるように λ を決める。つまり、極値条件を考えると

$$\frac{\mathrm{d}\bar{E}(\lambda)}{\mathrm{d}\lambda} = \frac{3\hbar^2}{4m} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{1}{\pi\lambda}\right)^{1/2} = 0 \tag{6.13}$$

より

$$\lambda = \frac{1}{\pi} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{4m}{3\hbar^2} \right)^2 = \frac{1}{\pi} \left(\frac{4}{3a_{\rm B}} \right)^2 \tag{6.14}$$

となる。これは最小の \bar{E} を与える。

$$\bar{E} = -\frac{4\hbar^2}{3\pi m a_{\rm B}^2} \tag{6.15}$$

これが変分関数として Gauss 型を仮定した場合の基底状態エネルギーの近似値である。厳密解を *E*₁ とすると

$$\bar{E} = \frac{8}{3\pi} E_1 \approx 0.849 \times E_1$$
 (6.16)

となる。*E*₁ は負の量なのでそれより少し大きい値となる。大きい値となるのは一般論から期待されるもの と矛盾しない。

6.1.3 励起状態*

変分法によって基底状態を近似する方法を議論したが、では励起状態はどうなるだろうか。とにかく最 小にすればよいという原理のみでは励起状態を定めることができないように思えるが、基底状態を近似的 にでも求めることができればそれを元にして励起状態を下から決定していくことが可能である。

基底状態の(近似)解を $|\psi_0\rangle$ と定めたとき、他の状態はそれに直交する。 $|\psi_0\rangle$ に直交する規格化された 状態 $|\psi_1\rangle$ を考える。これを用いて計算される期待値

$$\bar{E}_1 = \langle \psi_1 | \hat{H} | \psi_1 \rangle \tag{6.17}$$

を第一励起状態のエネルギーとする。 $|\psi_0\rangle$ を決定するのと同様にしてパラメータをいれておいてそれについて \bar{E}_1 が最小になるようにすればよい。基底状態 $|\psi_0\rangle$ を既に定めているとしているので、それに直交するようにすることで第一励起状態のエネルギーが定まる。

では、 \bar{E}_1 についてはどのような不等式が成り立つだろうか。第一励起状態の選択は基底状態の選択に強く依存するので、基底状態を精度よく定めることができなかった場合には、第一励起状態の精度も悪くなるだろう。もし基底状態を厳密に定めることができれば $\bar{E}_1 \ge E_1$ であることが予想される。

一般の公式を導くには基底状態に対する次の不等式を用いる。

$$|\langle 0|\psi_0\rangle|^2 \ge \frac{E_1 - E_0}{E_1 - E_0} \tag{6.18}$$

これは問題[6-1]で導く。このとき、次の関係が成り立つ。

$$\bar{E}_1 \ge E_0 + E_1 - \bar{E}_0 \tag{6.19}$$

つまり、上で述べたように $\overline{E}_0 = E_0$ が成り立つときは、 $\overline{E}_1 \ge E_1$ である。 $\overline{E}_0 > E_0$ の場合には \overline{E}_1 が E_1 を下回ることもある。

証明は基底状態のときに用いた不等式と同様にして導かれる。

$$\bar{E}_1 - E_1 = \langle \psi_1 | \hat{H} | \psi_1 \rangle - E_1$$
 (6.20a)

$$= \sum_{n} E_{n} |\langle n|\psi_{1}\rangle|^{2} - E_{1} \sum_{n} |\langle n|\psi_{1}\rangle|^{2}$$
(6.20b)

$$= -(E_1 - E_0)|\langle 0|\psi_1\rangle|^2 + \sum_{n(\neq 0)} (E_n - E_1)|\langle n|\psi_1\rangle|^2$$
(6.20c)

$$\geq -(E_1 - E_0)|\langle 0|\psi_1 \rangle|^2 \tag{6.20d}$$

であるが、 $|\psi_0\rangle$ と $|\psi_1\rangle$ は完全系の一部であるから、

$$|\langle 0|\psi_0\rangle|^2 + |\langle 0|\psi_1\rangle|^2 \le 1 \tag{6.21}$$

が成り立つ。よって、

$$\bar{E}_1 \ge E_1 - (E_1 - E_0) \left(1 - |\langle 0|\psi_0 \rangle|^2 \right)$$

(6.22a)

$$= E_0 + (E_1 - E_0) |\langle 0|\psi_0 \rangle|^2 \tag{6.22b}$$

$$\geq E_0 + E_1 - \bar{E}_0$$
 (6.22c)

となる。3行目で(6.18)式を用いた。

基底状態および第一励起を定めることができれば、同様にして第二励起状態、第三励起状態、...という ように下から順番に状態およびエネルギーを計算していくことができる。ただし、容易に予想されるよう に、励起状態になるほど近似の精度は悪くなっていく。

6.1.4 Rayleigh-Ritzの変分法

状態を適当な有限の正規直交基底 $\{|\phi_n\rangle\}_{n=1,\dots,M}$ で表現することを考えよう。

$$|\psi_n\rangle = \sum_{m=1}^M \lambda_m^{(n)} |\phi_m\rangle \tag{6.23}$$

考えている系の Hilbert 空間の次元が用意した正規直交基底の次元 M と等しければ正しい結果を導くが、 M の方が小さければ近似的な表現となる。有限の基底空間でハミルトニアンを考え、その空間内で最適な 解を求めるのも変分法の一種であり、Rayleigh-Ritz の変分法(Rayleigh-Ritz variational method)と よばれる。

変分法にしたがって期待値を書き表すと

$$\bar{E}_n(\lambda) = \frac{\langle \psi_n | \hat{H} | \psi_n \rangle}{\langle \psi_n | \psi_n \rangle} = \frac{\sum_{m,m'=1}^M \lambda_m^{(n)*} \lambda_{m'}^{(n)} \langle \phi_m | \hat{H} | \phi_{m'} \rangle}{\sum_{m=1}^M |\lambda_m^{(n)}|^2}$$
(6.24)

である。係数 λ について最適化を行う。極値を求めるために $\lambda_m^{(n)*}$ で微分を行うと

$$\frac{\partial \bar{E}_n(\lambda)}{\partial \lambda_m^{(n)*}} = \frac{\langle \phi_m | \hat{H} | \psi_n \rangle}{\langle \psi_n | \psi_n \rangle} - \frac{\langle \psi_n | \hat{H} | \psi_n \rangle}{\langle \psi_n | \psi_n \rangle} \frac{\lambda_m^{(n)}}{\langle \psi_n | \psi_n \rangle}$$
(6.25a)

$$= \frac{1}{\langle \psi_n | \psi_n \rangle} \left(\langle \phi_m | \hat{H} | \psi_n \rangle - \bar{E}_n \lambda_m^{(n)} \right)$$
(6.25b)

である¹。これが0であるという条件より、

$$\sum_{m'=1}^{M} \langle \phi_m | \hat{H} | \phi_{m'} \rangle \lambda_{m'}^{(n)} = \bar{E}_n \lambda_m^{(n)}$$
(6.26)

 $^{{}^1\}lambda_m^{(n)}$ と $\lambda_m^{(n)*}$ を独立変数とみて微分を行っている。実部と虚部についてそれぞれ微分を行っても同じ結果が得られる。

を得る。この式は固有値方程式に他ならない。

$$\begin{pmatrix} \langle \phi_1 | \hat{H} | \phi_1 \rangle & \cdots & \langle \phi_1 | \hat{H} | \phi_M \rangle \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ \langle \phi_M | \hat{H} | \phi_1 \rangle & \cdots & \langle \phi_M | \hat{H} | \phi_M \rangle \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda_1^{(n)} \\ \vdots \\ \lambda_M^{(n)} \end{pmatrix} = \bar{E}_n \begin{pmatrix} \lambda_1^{(n)} \\ \vdots \\ \lambda_M^{(n)} \end{pmatrix}$$
(6.27)

つまり、考えている空間でハミルトニアンを行列表示し、対角化を行えばよい。対角化によって M 個の近 似解 $\{\bar{E}_n\}$ を得る。

この手法は、元の系の次元が無限大であってもハミルトニアンを有限の行列として表し、近似解を行列 の大きさの数だけ得ることができる。非常に便利な方法である。例は問題 [6-7] で扱う。

6.2 平均場近似

6.2.1 Hartree 近似

変分法は複雑な系を解析するときに威力を発揮する。特に、多体系を扱うときの事実上標準的な近似法 としてさまざまな系でさまざまな形で用いられている。

次の N 粒子系ハミルトニアンを考える。

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^{N} \hat{H}_{i} + \sum_{\substack{i,j=1\\(i>j)}}^{N} V_{ij} = \sum_{i=1}^{N} \left(\frac{1}{2m} \hat{p}_{i}^{2} + U(\hat{r}_{i}) \right) + \sum_{\substack{i,j=1\\(i>j)}}^{N} V(|\hat{r}_{i} - \hat{r}_{j}|)$$
(6.28)

第1項は各粒子に独立に作用するハミルトニアン、第2項は粒子間の相互作用を表す。

目的は基底状態の波動関数とエネルギーを求めることである。基底状態の波動関数を次の形に仮定する。 $\phi_i(\boldsymbol{r}_i)$ は粒子 i の状態を表す。

$$\psi(\boldsymbol{r}_1,\ldots,\boldsymbol{r}_N) = \prod_{i=1}^N \phi_i(\boldsymbol{r}_i)$$
(6.29)

つまり、波動関数が変数分離できるという条件である。この条件が妥当であるかというと、疑問であると 言わざるをえない。ハミルトニアンが $\hat{H} = \sum_i \hat{H}_i$ のように各変数の和に分離できていればそのようなこと が可能であるが、今の場合、相互作用ポテンシャル $V(|\hat{r}_i - \hat{r}_j|)$ の項が存在する。そのようなとき、変数 分離できるという保証はない。変数分離できるということはある粒子の状態が他の状態とは独立に決まる ということを意味している。相互作用があるとそのような性質は成り立たない。相互作用がある系におい て固有値方程式を解くことは非常に難しい。分離できるという仮定をおくことで近似的に問題を解くこと が可能になる。

変分法では波動関数についてもう少し具体的に関数形を指定して最小化するが、ここでは1粒子波動関数 $\phi_i(\mathbf{r}_i)$ の具体形は指定しないで最小条件を考えてみよう。次の量を $\phi_i(\mathbf{r}_i)$ について最小化する条件を課し、 $\phi_i(\mathbf{r}_i)$ を決める方程式を導く。

$$\mathcal{E} = \langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle - \sum_{i=1}^{N} E_i \Big(\langle \phi_i | \phi_i \rangle - 1 \Big)$$
(6.30)

第2項は規格化条件 $\langle \phi_i | \phi_i \rangle = 1$ を課すために入れた。 E_i は未定乗数を表す。

最小条件を得るには形式的な変分原理が有効である。つまり、波動関数を $\phi_i \rightarrow \phi_i + \delta \phi_i$ と変えたときの最小(極値)条件を課せばよい。波動関数は一般に複素数であるので、 $|\phi_i\rangle \geq \langle \phi_i|$ を互いに独立な変数とすることができる。 $\langle \phi_i|$ で変分を考えると、

$$0 = \frac{\delta \mathcal{E}}{\delta \langle \phi_i |} = \hat{H}_i |\phi_i\rangle + \sum_{j(\neq i)} \langle \phi_j | \hat{V}_{ij} | \phi_j \rangle |\phi_i\rangle - E_i |\phi_i\rangle$$
(6.31)

を得る。つまり、

$$\hat{h}_i |\phi_i\rangle = E_i |\phi_i\rangle \tag{6.32}$$

$$\hat{h}_i = \hat{H}_i + \sum_{j(\neq i)} \langle \phi_j | \hat{V}_{ij} | \phi_j \rangle \tag{6.33}$$

という形で方程式を書くことができる。1 粒子の固有値方程式を解くことに帰着したように見えるが、 \hat{h}_i が他の粒子の波動関数に依存することに注意してほしい。ある粒子に作用する1粒子ハミルトニアンが他の粒子の波動関数に依存することで、多体効果を表している。各粒子が同種の粒子であれば1粒子波動関数 ϕ_i の関数形は全て同じで*i*によらない。解くべき式は固有状態を求めるためにハミルトニアンに固有状態が含まれているため、自己無撞着方程式(self-consistent equation)とよばれている。

近似の物理的意味を考察してみよう。 \hat{h}_i の中の相互作用項を座標表示してみると

$$\sum_{j(\neq i)} \langle \phi_j | \hat{V}_{ij} | \phi_j \rangle = \sum_{j(\neq i)} \int \mathrm{d}^3 \boldsymbol{r} \, \phi_j^*(\boldsymbol{r}) V(|\boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{r}|) \phi_j(\boldsymbol{r}) = \sum_{j(\neq i)} \int \mathrm{d}^3 \boldsymbol{r} \, V(|\boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{r}|) |\phi_j(\boldsymbol{r})|^2 \tag{6.34}$$

と書ける。これは粒子jが r_i の位置にポテンシャル

$$\int d^3 \boldsymbol{r} \, V(|\boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{r}|) |\phi_j(\boldsymbol{r})|^2 \tag{6.35}$$

をつくることを意味している。座標 r の位置の存在確率密度にポテンシャルをかけたものが有効ポテンシャ ルとなる。

ここで行っている近似は、Hartree 近似(Hartree approximation)より一般には平均場近似(mean-field approximation)とよばれる。相互作用のある系を相互作用のない系とみなす近似である。相互作用の効果は平均場として有効ポテンシャルにおきかえられる。固有値方程式を解いて波動関数を得るには有効ハミルトニアンを求めないといけない。ところが、ハミルトニアンは波動関数を用いて表されている。波動関数を適当に仮定してハミルトニアンを用いて固有値方程式を解くと、一般には異なる波動関数が得られる。 そこで、その得られた解を用いてまた有効ハミルトニアンを計算し固有値方程式を解き直す。このような過程をくりかえすと、答えがある一定の関数に収束し、自己無撞着方程式を解くことができる場合がある。

自己無撞着方程式を解く方法については以下の例や問題にまわして、得られた解を用いて基底エネルギー がどのように表されるかを調べる。エネルギーの近似値は期待値で表される。

$$\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle = \sum_{i=1}^{N} \langle \phi_i | \hat{H}_i | \phi_i \rangle + \sum_{i>j} \langle \phi_i, \phi_j | \hat{V}_{ij} | \phi_i, \phi_j \rangle$$
(6.36a)

$$= \sum_{i=1}^{N} \langle \phi_i | \left(\hat{H}_i + \frac{1}{2} \sum_{j(\neq i)} \langle \phi_j | \hat{V}_{ij} | \phi_j \rangle \right) | \phi_i \rangle$$
(6.36b)

$$= \sum_{i=1}^{N} E_i - \sum_{i>j} \langle \phi_i, \phi_j | \hat{V}_{ij} | \phi_i, \phi_j \rangle$$
(6.36c)

1 粒子毎の固有値方程式からみると $\sum_{i=1}^{N} E_i$ が全エネルギーを与えるように思われるが、正しくない。それは平均場近似をするとお互いにお互いのポテンシャルを作り出すということからエネルギーを数えすぎてしまうからである。 $V(|r_i - r_j|)$ は粒子 i の平均場を作り出すが、同時に j のものも作り出す。上の式のようにすれば第 2 項がその数えすぎを引き去ってくれる。ポテンシャルが常に正であれば、全エネルギーは $\sum_{i=1}^{N} E_i$ より小さくなる。

「熱・統計力学第二」をよく勉強したひとは気づいたはずであるが、この近似は Ising 模型において行ったものと同じである。その場合もスピン間の相互作用が有効磁場におきかえられる。エネルギーの数えすぎなどの詳細もよく似ている。

6.2.2 2 粒子系

Hartree 近似の一般形を見ているだけではややわかりにくいので、具体的に N = 2、Coulomb ポテンシャルの場合を考えてみよう。つまり、ヘリウムの系である。電子二つと原点におかれた原子核がお互いに相互作用している。このときのハミルトニアンは

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^{2} \left(\frac{1}{2m} \hat{p}_{i}^{2} - \frac{2e^{2}}{4\pi\epsilon_{0}} \frac{1}{\hat{r}_{i}} \right) + \frac{e^{2}}{4\pi\epsilon_{0}} \frac{1}{|\hat{r}_{1} - \hat{r}_{2}|}$$
(6.37)

である。Hartree 近似にしたがって、1 粒子ハミルトニアンを書き下すと

$$\hat{h}_1 = \frac{1}{2m}\hat{p}_1^2 - \frac{2e^2}{4\pi\epsilon_0}\frac{1}{\hat{r}_1} + \langle \phi_2 | \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\frac{1}{|\hat{r}_1 - \hat{r}_2|} |\phi_2\rangle$$
(6.38)

である。

厳密に方程式を解くことは難しいので、さしあたって相互作用項を無視したときの基底状態の波動関数 を用いて有効ポテンシャルを計算してみる。基底状態の波動関数は

$$\phi_2(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} \mathrm{e}^{-r/a} \tag{6.39}$$

であるから、

$$\langle \phi_2 | \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{|\hat{\boldsymbol{r}}_1 - \hat{\boldsymbol{r}}_2|} | \phi_2 \rangle = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int \mathrm{d}\boldsymbol{r}_2 \, \frac{\phi_2^2(\boldsymbol{r}_2)}{|\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2|} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r_1} \left[1 - \left(1 + \frac{r_1}{a} \right) \mathrm{e}^{-2r_1/a} \right] \tag{6.40}$$

となる。これは正の値をもつ。元のポテンシャルとあわせて有効ポテンシャルとして

$$V(\mathbf{r}) = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left\{ -\frac{2}{r} + \frac{1}{r} \left[1 - \left(1 + \frac{r}{a}\right) e^{-2r/a} \right] \right\}$$
(6.41a)

$$\rightarrow \begin{cases} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left(-\frac{2}{r} + \frac{1}{a}\right) & r \to 0\\ -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} & r \to \infty \end{cases}$$
(6.41b)

を得る。電子の影響でポテンシャルに斥力が加わる。 $r \to \infty$ では原子核と電子 2 の電荷をあわせた Coulomb ポテンシャルが電子 1 にかかるから、最後の結果は自然である。

6.3 問題

 $[\mathbf{A}]$

[6-1] 基底状態変分関数の不等式

変分法を用いて基底状態 $|\psi_0
angle$ と基底エネルギー $ar{E}_0 = \langle\psi_0|\hat{H}|\psi_0
angle$ を定めたとする。このとき、次の不等式を示せ。

$$|\langle 0|\psi_0\rangle|^2 \ge \frac{E_1 - \bar{E}_0}{E_1 - E_0}$$
(6-1.1)

*E*₁は第一励起状態のエネルギーを表す。

[6-2] 井戸型ポテンシャル

次の井戸型ポテンシャルを考える。

$$V(x) = \begin{cases} 0 & |x| < L\\ \infty & |x| > L \end{cases}$$

$$(6-2.1)$$

基底状態の波動関数を

$$\psi(x) = A(L^k - |x|^k) \tag{6-2.2}$$

と近似する。Aは規格化定数を表す。 変分法より k を定め、基底エネルギーを求めよ。また、解を厳密解 と比較せよ。

[6-3] 調和振動子

1次元調和振動子の系において次の関数を試行関数として変分法によりパラメータ λ を定め、基底状態のエネルギーをそれぞれ近似的に求めよ。

$$\psi_1(x;\lambda) \propto (\lambda^2 - x^2)\theta(\lambda^2 - x^2) \tag{6-3.1}$$

$$\psi_2(x;\lambda) \propto \exp(-\lambda|x|)$$
 (6-3.2)

 $[\mathbf{B}]$

[6-4] 非調和振動子

次のハミルトニアンの基底状態のエネルギーを近似的に求める。

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{p}^2 + \frac{m\omega^2}{2}(\hat{x}^2 + \lambda\hat{x}^4)$$
(6-4.1)

全てのパラメータは正とする。

(a). 基底状態の波動関数を Gauss 型と仮定する。

 $\psi(x) \propto e^{-\alpha x^2} \tag{6-4.2}$

変分法を用いてパラメータ α を定める式を書き下せ。

(b). λ の項を摂動として扱う。摂動の1次および2次の近似を用いて基底状態のエネルギーをそれぞれ 求めよ。

(c). (a) と (b) でそれぞれ求めた (3 種類の) 近似解を比較する。 \hbar 、m、 ω 、 λ を全て 1 として数値を求め、比較を行え。数値を求める際、計算機等を用いてよい。

[6-5] 状態に関する不等式

(a). ある状態 $|\psi\rangle$ に対してエネルギー期待値を

$$E = \langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle \tag{6-5.1}$$

とする。この値に最も近いエネルギー固有値を *E_n* とすると、

$$E_n - \sigma \le E \le E_n + \sigma \tag{6-5.2}$$

が成り立つ。 σ はハミルトニアンの2乗分散

$$\sigma = \left(\langle \psi | \hat{H}^2 | \psi \rangle - \langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle^2 \right)^{1/2} \tag{6-5.3}$$

を表す。式 (6-5.2) を示せ。

(b). 問題 [2-9] より

$$\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle + \sigma|\psi^{\perp}\rangle \tag{6-5.4}$$

と書けて状態 $|\psi^{\perp}\rangle$ を定義できる。(a) の結果を用いて $|\psi\rangle$ と $|\psi^{\perp}\rangle$ の関係について何が言えるか考察せよ。

(c). 次の式を示せ。

$$\langle \psi | (\hat{H} - E_0) (\hat{H} - E_1) | \psi \rangle \ge 0$$
 (6-5.5)

 E_0 は基底状態のエネルギー、 E_1 は第一励起状態のエネルギーを表す。また、この不等式を用いて何が言えるか考察せよ。

[6-6] 横磁場 Ising 模型

1次元横磁場 Ising 模型を考える。J > 0、 $\Gamma > 0$ 、 $\hat{\sigma}_{N+1} = \hat{\sigma}_1$ とする。

$$\hat{H} = -J \sum_{i=1}^{N} \hat{\sigma}_{i}^{z} \hat{\sigma}_{i+1}^{z} - \Gamma \sum_{i=1}^{N} \hat{\sigma}_{i}^{x}$$
(6-6.1)

変分法を用いて系の基底状態を近似的に求める。基底状態を次のように各スピン状態の積とする。

$$|\psi\rangle = \prod_{i=1}^{N} |+\boldsymbol{n}_i\rangle \tag{6-6.2}$$

 $|+n_i\rangle$ は問題 [1-2] で定義された状態であり、二つの角度 $(heta_i, arphi_i)$ を用いて表される。

(a). 期待値 $\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle$ を $\{ \theta_i, \varphi_i \}_{i=1,...,N}$ について最適化して、基底状態およびエネルギーの近似解を求めよ。解はなるべく簡単と思われるものを求めよ。

(b). 次のように定義される基底状態の磁化 $m \in \Gamma/J$ の関数として求めて図示せよ。

$$m = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \langle \psi | \hat{\sigma}_i^z | \psi \rangle \tag{6-6.3}$$

[C]

[6-7] Stark 効果

Stark 効果のハミルトニアンを考える。

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{p}^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\frac{1}{\hat{r}} - eE_z\hat{z}$$
(6-7.1)

基底状態の変分関数を電場がないときの固有関数の適当な線形結合で表す。

$$|\psi\rangle = c_1|1,0,0\rangle + c_2|n,\ell,m\rangle \tag{6-7.2}$$

(a). 電場がそれほど強くないとき、 (n, ℓ, m) をそれぞれいくつに設定するのがもっとも自然か。

(b). (a) の (n, ℓ, m) を用いるとき、 $c_1 \ge c_2$ を変分パラメータとして変分法を適用し、近似状態がどの程 度 $|1, 0, 0\rangle$ を含むか調べよ。

第II部

多体系

第7章 同種粒子

量子力学第一・第二もあわせてここまで量子力学のさまざまな性質を見てきた。基本的にはほとんどの 性質は1粒子1自由度の簡単な例を用いて説明できるものである。第II部では多体系の性質を扱う。一般 に、多体系は1粒子系にはない複雑さがあるが、同種粒子の性質をとりいれると多体系の量子力学ならでは の現象を見ることができる。まず、本章では同種粒子の性質について議論する。粒子はBose粒子とFermi 粒子の二つに大別され、それぞれ全く異なる性質を示す。「熱・統計力学第二」においてすでに扱ったが、 純粋な量子力学の観点から改めて見直してみる。

7.1 Bose · Fermi 粒子

7.1.1 同種粒子とハミルトニアン

同種粒子の識別不能性によってもたらされる帰結を考察する。質量や電荷等全く同じ属性をもった粒子 は原理的に見分けがつかない。属性が同じである以上区別をする必要がないわけである。量子力学的状態 は測定を行うまでわからないし、測定を行うと異なるものに変わってしまうので、粒子を区別できないと する方が自然である。

例えば、二つの同種粒子の散乱問題を考えよう。図 7.1 のように、左と右から粒子を入射させて上と下 に粒子が散乱されたとする。このとき、上に散乱される粒子は左からきたものか右からきたものか判別す る術は何もないし、そもそも区別することはできない。このことにより、同種粒子の散乱は区別がつかな いことによることを考慮する必要がある(問題 [7-2])。

粒子の区別がつかないことは次のことを意味する。ハミルトニアンはそれぞれの粒子の状態に作用する座 標 r、運動量 p などの演算子を用いて書ける。他の演算子があればそれも追加して考える。2 粒子の場合、

$$\hat{H} = H(\hat{r}_1, \hat{p}_1, \hat{r}_2, \hat{p}_2)$$
(7.1)

である。添字がそれぞれの粒子を表す。同種粒子であるとハミルトニアンは次の対称性をもつ。

$$H(\hat{\boldsymbol{r}}_1, \hat{\boldsymbol{p}}_1, \hat{\boldsymbol{r}}_2, \hat{\boldsymbol{p}}_2) = H(\hat{\boldsymbol{r}}_2, \hat{\boldsymbol{p}}_2, \hat{\boldsymbol{r}}_1, \hat{\boldsymbol{p}}_1)$$
(7.2)

同種粒子であるからどの粒子にもハミルトニアンは同じように作用する。

例えば、N 粒子系のハミルトニアンは

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^{N} \left(\frac{\hat{p}_{i}^{2}}{2m} + U(\hat{r}_{i}) \right) + \sum_{\substack{i,j=1\\(i>j)}}^{N} V(|\hat{r}_{i} - \hat{r}_{j}|)$$
(7.3)

という形をとることが多い。U は各粒子に作用するポテンシャル、V は 2 粒子間に働く相互作用を表す。 粒子に働く力はポテンシャルU によるものと相互作用V によるものに分類できる。この違いについて改め て考えてみよう。力学には作用・反作用の法則とよばれる法則が存在し、ある粒子が力を受けると同時にそ の粒子が力を及ぼす系にも力を与えている。外部の環境によってもたらされるU は粒子に力を与えるが、 その粒子は外部の環境をなす粒子にも影響を及ぼしている。ところがそのような力は多くの場合ほとんど 問題にならない。箱に閉じ込められた粒子は箱に力を及ぼすが、箱の運動を考えることは通常ない。この ように作用を一方的に扱う場合、「箱」のもつ自由度を力学変数として扱うことはない。これが「外場」U の由来となる。したがって、全宇宙の構成要素を同時に扱うことができない以上、U のような項が必要と



図 7.1: 同種粒子の散乱。

なる¹。本来は *U* も *V* と同じように記述できるはずであるが現実的な系では外場として扱うのが自然なのである。

V は 2 体相互作用を表しており、2 粒子の距離にのみ依存することが多い。これまでにも中心力ポテンシャルとして扱われてきた。多粒子の系においても同様の相互作用が働く。重ねあわせの原理により、相互作用は 2 粒子の対に働く相互作用の和となる。N 粒子の系において、2 体相互作用の和の数は N(N-1)/2となる。通常、多粒子系において 3 体力、4 体力のような複雑な相互作用を扱うことはない²。

7.1.2 同種粒子と波動関数

次に、粒子の非識別性が状態に及ぼす影響について考えてみよう。議論を分かりやすくするために、波動関数を考える。スピン自由度などは後で導入することとしてここでは考えない。2粒子の波動関数はそれぞれの粒子の座標の関数 $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ である。この波動関数は次の対称性を満たすだろうか?

$$\psi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) \stackrel{!}{=} \psi(\boldsymbol{r}_2, \boldsymbol{r}_1) \tag{7.4}$$

これは、粒子が識別できない以上、座標をいれかえても関数形は変わらないことを意味している。

ここで思い出してほしいのは、波動関数そのものは観測できる量ではないことである。その絶対値の2 乗が粒子の存在する確率密度を表している。つまり、波動関数には位相の不定性がある。そのことを考え れば、粒子の座標をいれかえたとき

$$\psi(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1) = e^{i\theta} \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \tag{7.5}$$

でもよいはずである。 θ は任意の実定数を表す。 $|\psi(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2)|^2 = |\psi(\mathbf{r}_2,\mathbf{r}_1)|^2$ であるから確率密度は変化しないし、ハミルトニアンが対称である限り同じ Schrödinger 方程式を満たす。

では、もう一度粒子の座標をいれかえてみたらどうなるだろうか。ここで強調しておきたいのは、「粒子の座標をいれかえる」という操作は実際に粒子をいれかえているわけではないということである。つまり、 これは物理的な操作ではなく単なる座標の読みかえに過ぎない³。したがって、2回読みかえを行った場合 元に戻るはずである。

$$e^{2i\theta}\psi(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2) = \psi(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2) \tag{7.6}$$

実際に粒子のいれかえを行っているわけではないから位相の違いが生じてもよいということにはならない。 このようにして $e^{2i\theta} = 1$ から $e^{i\theta} = \pm 1$ となり、

$$\psi(\boldsymbol{r}_2, \boldsymbol{r}_1) = \pm \psi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) \tag{7.7}$$

¹素粒子論では全ての力は相互作用によって生じると考える方が自然である。

²有効3体力を考えることはある。

³教科書によっては、粒子のいれかえ演算子というものを定義して議論を行っているが、いれかえが物理的な過程でない以上、そのような演算子を定義すると誤解される恐れがある。したがってここではそのような演算子は用いない。

の2通りの性質が導かれる⁴。+の場合を Bose-Einstein 統計(Bose-Einstein statistics)とよび、それに 従う粒子を Bose 粒子(Boson)とよぶ。-の場合は Fermi-Dirac 統計(Fermi-Dirac statistics) Fermi 粒子(Fermion)とよぶ。

任意の粒子数の系に対して統計性を考慮することは同様の手続きによってなされる。N 粒子の系において任意の2 粒子の座標を読みかえたとき、Bose-Einstein/Fermi-Dirac 統計それぞれにおいて

$$\psi(\mathbf{r}_1,\ldots,\mathbf{r}_i,\ldots,\mathbf{r}_j,\ldots,\mathbf{r}_N) = \pm \psi(\mathbf{r}_1,\ldots,\mathbf{r}_j,\ldots,\mathbf{r}_i,\ldots,\mathbf{r}_N)$$
(7.8)

となる。i, jは1からNの任意の自然数を表す(i < j)。各粒子がスピンのような内部自由度をもつ場合には、同種粒子とみなされるためにはそれらの量子数も完全に同じでなければならない。

このような簡単な議論によって導かれる関係を用いて量子系の非自明な性質を導くことができる。もっとも簡単に導くことができる性質は Fermi 粒子系における Pauli の排他律 (Pauli exclusion principle)である。Fermi 粒子系では粒子の座標をいれかえると符号が変わる。

$$\psi(\boldsymbol{r}_2, \boldsymbol{r}_1) = -\psi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) \tag{7.9}$$

 $r_1 = r_2 = r$ とおくと

$$\psi(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}) = -\psi(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}) \tag{7.10}$$

つまり

$$\psi(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}) = 0 \tag{7.11}$$

となる。二つの Fermi 粒子が同じ位置にいる確率は 0 となる。粒子が一つ占められている位置に同じ粒子 をもってくることはできない。相互作用がある系では Coulomb 力のような斥力により粒子が近づくことが 妨げられるのは古典系でも起こりえる性質であるが、ここでの結果は粒子が同種粒子であれば相互作用の 有無に関わらず生じるという、きわめて非自明な効果である。また、Fermi 粒子であれば粒子は同じ「状 態」をとることが禁止される。状態というのが何を意味するのか紛らわしいのでここでは詳しい説明を省 略し、以下の節で具体的に議論する。排他律は Pauli が原子のスペクトル構造から読みとった法則である が、量子統計の性質を用いることによって導かれる。

Bose 粒子の場合、粒子はいくつでも同じ状態を占めることができる。同種粒子であることを考慮しない 場合との違いがわかりにくいが、この場合もやはり非自明な現象を引き起こす。状態の数え方が異なるの は統計力学で調べた通りである。同種粒子の効果をとりいれないと低温でまともな熱力学関数を得ること ができない⁵。また、Bose 粒子多体系は低温で Bose-Einstein 凝縮を引き起こす。

7.1.3 複合粒子の統計

同種粒子の系のもつ対称性は、複合系を考えたときに興味深い性質をもたらす。複合系というのは複数の 粒子が束縛してひとつの粒子をつくるようなものである。このような複合系と全く同じ系を用意する。全 ての粒子が二つの系でそれぞれ全く同じ状態をとっているとき、二つの系は見分けがつかない。一つの複 合系で複数の粒子が束縛されている必要性はないが、束縛されていない状態では全く同じ状態を用意する のが困難になるので束縛されている複合粒子を考えるのが現実的である。

図 7.2 のような 2 個の Fermi 粒子からなる複合粒子を考えよう。複合粒子が二つある系の波動関数は

$$\psi(\mathbf{r}_1(1), \mathbf{r}_2(1); \mathbf{r}_1(2), \mathbf{r}_2(2))$$
 (7.12)

⁴粒子をいれかえるのが物理的過程でないならば、1回いれかえたときも位相が変わってはいけないのではないかと思うかもしれ ないが、波動関数の定義に不定性があることは確かなので、1回では位相の違いがありえる。

⁵低温では2粒子が全く同じ状態を占める確率が高く、違いがあらわれる。



図 7.2: 複合粒子の対称性。二つの Fermi 粒子からなる複合粒子は Bose 粒子としてふるまう。

のように書ける。括弧内の1、2は複合粒子のラベル、下つき添字の1と2は複合粒子内の粒子の番号をそ れぞれを表す。複合粒子内の2個の粒子は同種粒子であればやはり座標のいれかえに対する対称性をもつ が、ここではそれではなく複合粒子の座標をいれかえることを考えてみよう。つまり、

$$\psi(\mathbf{r}_1(2), \mathbf{r}_2(2); \mathbf{r}_1(1), \mathbf{r}_2(1))$$
(7.13)

を考える。これは $r_1(1) \leftrightarrow r_1(2)$ 、 $r_2(1) \leftrightarrow r_2(2)$ のいれかえを同時に行っている。それぞれは Fermi 粒子 であるから一つのいれかえについて – の符号を得る。それを 2 回行うのであるから

$$\psi(\mathbf{r}_1(1), \mathbf{r}_2(1); \mathbf{r}_1(2), \mathbf{r}_2(2)) = \psi(\mathbf{r}_1(2), \mathbf{r}_2(2); \mathbf{r}_1(1), \mathbf{r}_2(1))$$
(7.14)

が成り立つ。つまり Fermi 粒子二つからなる複合粒子を一つの粒子とみたとき、それは Bose 粒子のように ふるまう。

一般化も容易である。偶数の Fermi 粒子からなる複合粒子は Bose 粒子、奇数の Fermi 粒子からなる複 合粒子は Fermi 粒子になる。Bose 粒子からなる場合や、Bose 粒子と Fermi 粒子が混ざった場合を考える こともできる。Bose 粒子はいれかえで符号を変えないから、要は Fermi 粒子が奇数あるかどうかがわかれ ばよい。このように、Fermi 粒子といえども複合粒子として見た場合には Bose 粒子になるという興味深い 結果を得る。これは例えば、ヘリウム原子の系において見ることができる。ヘリウム原子は通常⁴He と書 かれるように陽子 2 個、中性子 2 個の原子核と 2 個の電子からなるが、同位体として陽子 2 個、中性子 1 個の原子核と 2 個の電子をもつ ³He も自然に存在する⁶。陽子や中性子、電子といった粒子は全て Fermi 粒 子であることが知られている。従って、Fermi 粒子が偶数ある ⁴He は Bose 粒子、奇数ある ³He は Fermi 粒子としてふるまう。それらの粒子は低温で大きく異なるふるまいを示す⁷。

二つの複合粒子が同種粒子とみなされるためには各粒子の構成要素が完全に同じ状態になっていなけれ ばならない。したがって、複合粒子内の粒子数が大きければ大きいほど実現は困難になる。

7.2 多粒子系の波動関数

量子統計性を適用したときに状態がどのような構造をもっているかを調べよう。まず、簡単な場合として2粒子が独立に運動している系を考える。ハミルトニアンは二つの項からなる。

$$\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2 \tag{7.15}$$

第1項が粒子1に第2項が粒子2に作用する。両者は同種粒子であり、 \hat{H}_1 と \hat{H}_2 は添字以外完全に同じものであるとする。

 $^{^6}$ 大気中において $^3\mathrm{He}$ は $^4\mathrm{He}$ の 100 万分の 1 程度の量しか存在しない。

⁷両者ともに低温で超流動状態になる。これは Bose 粒子の特徴を反映した性質である。 4 He は 3 He より超流動状態になりやすい。つまり、超流動転移温度が高い。 3 He は二つのヘリウム原子の対が Bose 粒子になる必要があるため、 4 He より 3 桁も転移温度が低い。

時間に依存しないハミルトニアンの系ではエネルギーは保存し、問題は固有値方程式を解くことに帰着 する。状態を

$$|\psi(t)\rangle = e^{-iEt/\hbar}|\psi\rangle \tag{7.16}$$

とおいたとき、右辺の状態 $|\psi\rangle$ は固有値方程式

$$\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle \tag{7.17}$$

より求まる。以下ではこの状態 | ψ 〉の座標表示、つまり波動関数を考える。

ハミルトニアンが分離されている系では状態も変数分離して解くことができる。ハミルトニアンは和で 分離されたが、波動関数は積で分離する。

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \psi_1(\mathbf{r}_1)\psi_2(\mathbf{r}_2) \tag{7.18}$$

このとき、各変数について固有値問題

$$H_1\phi_n(\boldsymbol{r}_1) = E_n\phi_n(\boldsymbol{r}_1) \tag{7.19}$$

を解くことによって固有状態が求まる。

$$\psi_{n_1,n_2}(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2) = \phi_{n_1}(\mathbf{r}_1)\phi_{n_2}(\mathbf{r}_2) \tag{7.20}$$

とすれば全エネルギーは

$$E = E_{n_1} + E_{n_2} \tag{7.21}$$

と書ける。

得られた状態は量子統計の性質を満たしていない。状態は二つの量子数 n₁、n₂ によって特徴づけられるが、

$$\psi_{n_1,n_2}(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\phi_{n_1}(\mathbf{r}_1)\phi_{n_2}(\mathbf{r}_2) \pm \phi_{n_2}(\mathbf{r}_1)\phi_{n_1}(\mathbf{r}_2)\right) & n_1 \neq n_2 \\ \phi_{n_1}(\mathbf{r}_1)\phi_{n_1}(\mathbf{r}_2) & n_1 = n_2 & \text{Bose} \\ 0 & n_1 = n_2 & \text{Fermi} \end{cases}$$
(7.22)

と対称または反対称にすれば量子統計の要請を満たしている。各項は変数分離された解で表されているが、 全体としては変数分離できる波動関数とは限らない。Schrödinger 方程式は線形の方程式であるので重ねあ わせの原理が成り立つ。つまり、 ψ_1 および ψ_2 が解であればそれらの線形結合もまた解となる。このこと を利用すると波動関数を対称または反対称に保つことができる。どの項も同じエネルギーを与える。Fermi 粒子の場合、Pauli の排他律を反映して粒子が同じ状態をとることはできない($n_1 \neq n_2$)こともわかる。 前節で見たように、 $n_1 \neq n_2$ でも $\psi_{n_1,n_2}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}) = 0$ である。

ー般化も容易である。N 粒子の系で各粒子の1 粒子状態が (n_1, n_2, \ldots, n_N) であるとする。対応する1 粒子波動関数は $\phi_{n_i}(\mathbf{r})(i = 1, \ldots, N)$ である。Bose 粒子のときは対称化された状態を考える。各固有状態 は同じ状態をいくつでも占めることができるので重複している準位も考慮する必要がある。準位 i の縮退 数を d_i とすると、

$$\Psi_{n_1,\dots,n_N}^{(B)}(\boldsymbol{r}_1,\dots,\boldsymbol{r}_N) = \frac{1}{\sqrt{N!d_1!d_2!\cdots}} \sum_{\mathbf{P}} \phi_{n_1}(\boldsymbol{r}_{\mathbf{P}(1)})\cdots\phi_{n_N}(\boldsymbol{r}_{\mathbf{P}(N)})$$
(7.23)

と書ける。和は (1, 2, ..., N) の任意の組み合わせについてとる。全部で N! 通りある。例えば、N = 3 のと きは (1, 2, 3)、(1, 3, 2)、(2, 3, 1)、(2, 1, 3)、(3, 1, 2)、(3, 2, 1) である。P(i) はそれぞれのときの i 番目の値 を表す。規格化定数のうち、N!の因子は和の数が N! 個あることから容易にわかる。縮退 d があると座標 のいれかえによって変化しない組み合わせが d! だけ生じるので数えすぎを補正する役割を果たしている。 具体的に簡単な場合を書き下して確かめてほしい。 Fermi 粒子のときは各 1 粒子状態をあらわす値 (n_1, n_2, \ldots, n_N) は重複していない。よって規格化定数は N!のみですむ。代わりにいれかえに対する負符号を考慮する必要がある。

$$\Psi_{n_1,\dots,n_N}^{(\mathrm{F})}(\boldsymbol{r}_1,\dots,\boldsymbol{r}_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\mathrm{P}} (-1)^{\mathrm{P}} \phi_{n_1}(\boldsymbol{r}_{\mathrm{P}(1)}) \cdots \phi_{n_N}(\boldsymbol{r}_{\mathrm{P}(N)})$$
(7.24)

 $(-1)^{P}$ は $(1,2,\ldots,N)$ のとき +1 として偶置換のとき +1、奇置換のとき -1 の値をとる。例えばN = 3のとき、(1,2,3)、(2,3,1)、(3,1,2)は +1 で(1,3,2)、(2,1,3)、(3,2,1)は -1 である。Fermi 粒子の場合、波動関数を次のように行列式で表現することもできる。

$$\Psi_{n_{1},\dots,n_{N}}^{(\mathrm{F})}(\boldsymbol{r}_{1},\dots,\boldsymbol{r}_{N}) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \phi_{n_{1}}(\boldsymbol{r}_{1}) & \phi_{n_{2}}(\boldsymbol{r}_{1}) & \cdots & \phi_{n_{N}}(\boldsymbol{r}_{1}) \\ \phi_{n_{1}}(\boldsymbol{r}_{2}) & \phi_{n_{2}}(\boldsymbol{r}_{2}) & \cdots & \phi_{n_{N}}(\boldsymbol{r}_{2}) \\ & & \vdots \\ \phi_{n_{1}}(\boldsymbol{r}_{N}) & \phi_{n_{2}}(\boldsymbol{r}_{N}) & \cdots & \phi_{n_{N}}(\boldsymbol{r}_{N}) \end{vmatrix}$$
(7.25)

これを Slater 行列式 (Slater determinant) という。行列式の性質から Pauli の排他律が自然と導かれる ことがわかり便利である。Bose 粒子の場合、同様の表現をするには行列式を考えるときにつける負符号を 全て正に変えればよい。そのような行列式はパーマネント (permanent) とよばれる。

以上のように波動関数を対称化または反対称化すれば粒子が区別できないという性質をとりいれた状態 を得ることができる。このような波動関数の対称化/反対称化はさまざまな性質をもたらすが、特筆すべき は粒子数が大きくなるほど顕著になる重ねあわせの効果である。波動関数が N! 個程度の和で表されると いうことは、多粒子の系ではきわめてたくさんの項が必要とされる。このことは量子系の特徴のひとつで ある干渉効果をもたらす。粒子の存在する確率密度は波動関数の絶対値の 2 乗で与えられ、項数は $(N!)^2$ の莫大な数になる。例えば、Bose 粒子のときに全ての粒子を同じ座標点 r に見出す確率密度を考えてみよ う。式 (7.23) で $r_1 = r_2 = \cdots = r_N = r$ とおくと全ての項は同じになるので

$$\psi_{n_1,\dots,n_N}^{(\mathrm{B})}(\boldsymbol{r},\dots,\boldsymbol{r}) = \sqrt{\frac{N!}{d_1!d_2!\cdots}}\phi_{n_1}(\boldsymbol{r})\cdots\phi_{n_N}(\boldsymbol{r})$$
(7.26)

となる。絶対値の2乗をとると

$$|\psi_{n_1,\dots,n_N}^{(B)}(\boldsymbol{r}_1,\dots,\boldsymbol{r}_N)|^2 = \frac{N!}{d_1!d_2!\cdots} |\phi_{n_1}(\boldsymbol{r})\cdots\phi_{n_N}(\boldsymbol{r})|^2$$
(7.27)

であるから、確率密度は統計性を考慮しない場合と比較して N!/(d₁!d₂!···) 倍となる。全ての粒子が全く 同じ1 粒子状態を占めるというような極端な状況を考えない限りこの値は莫大な数となる。Bose 粒子を同 じ座標点に見出す確率は古典の場合と比較して非常に大きい。このような性質から、Bose-Einstein 凝縮の ような特異な現象が引き起こされることが示唆される。粒子の区別がつかないことが量子系の最大の特徴 のひとつである状態の重ねあわせをもたらし、波動関数の干渉を引き起こす。重ねあわせの状態はさらに もうひとつの重要な現象をもたらすが、それは第 III 部で議論する。

7.3 相互作用する2粒子の系

前節では相互作用のない場合の系の波動関数の構成を考えた。相互作用のある系では波動関数は変数分離できないので相互作用の形に応じて問題を考えないといけない。そこで、ここでは「量子力学第二」で詳しく扱った中心力相互作用を行う2粒子系を量子統計という観点からもう一度見直してみよう。考えるハミルトニアンは次の形をもつ。

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left(\hat{p}_1^2 + \hat{p}_2^2 \right) + V(|\hat{r}_1 - \hat{r}_2|)$$
(7.28)

同じ質量をもった同種粒子がそれらの距離に依存した相互作用を行う系である。

復習も兼ねて簡単に問題の解き方を追ってみよう。この系の波動関数を求めるには固有値方程式を解け ばよい。

$$H\psi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) = E\psi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) \tag{7.29}$$

系の波動関数は一般に固有関数の線形結合で表されるので固有値方程式を解く必要がある。まず、座標変換を行う。相互作用ポテンシャルは2粒子の座標の差のみによるから、この系は並進不変である。そのような系では次のように重心座標 R と相対座標 r を用いるのが常套手段である。

$$\boldsymbol{R} = \frac{\boldsymbol{r}_1 + \boldsymbol{r}_2}{2} \tag{7.30}$$

$$\boldsymbol{r} = \boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2 \tag{7.31}$$

並進不変な系では重心座標に関しては自由粒子と同じようにふるまう。つまり、ハミルトニアンは

$$\hat{H} = \frac{1}{2M}\hat{p}_R^2 + \frac{1}{2m}\hat{p}_r^2 + V(\hat{r})$$
(7.32)

と書ける。 p_R は Rの共役運動量、 p_r は rの共役運動量である。M = 2mは 2 粒子の全質量を表す。相互作用ポテンシャルは相対座標 rのみによる。ハミルトニアンが変数分離している系では波動関数を変数分離して固有値方程式を解くことができる。

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \psi_R(\mathbf{R})\psi_r(\mathbf{r}) \tag{7.33}$$

とおくと、

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{R}}^2\psi_R(\boldsymbol{R}) = E_R\psi_R(\boldsymbol{R})$$
(7.34)

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{r}}^2 + V(\boldsymbol{r})\right)\psi_r(\boldsymbol{r}) = E_r\psi_r(\boldsymbol{r})$$
(7.35)

を得る。元のハミルトニアンのエネルギーを表す固有値 E はそれぞれの固有値の和 $E = E_R + E_r$ で書ける。

重心座標の方程式は自由粒子と同じであるから、相対座標の部分に注目しよう。ポテンシャルは座標の 大きさ $r = |\mathbf{r}|$ のみに依存する。Coulomb相互作用など多くの相互作用はこのような回転対称性を満たす。 回転対称な系では極座標を用いると動径座標と角度座標を分離することができる。

$$\mathbf{r} = \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} r\sin\theta\cos\varphi \\ r\sin\theta\sin\varphi \\ r\cos\theta \end{pmatrix}$$
(7.36)

このとき、波動関数は変数分離されて

$$\psi_r(\mathbf{r}) = R(r)Y_{\ell,m}(\theta,\varphi) \tag{7.37}$$

と書ける。 $Y_{\ell,m}(\theta,\varphi)$ は球面調和関数を表す。動径座標の波動関数 R(r)はポテンシャルに依存する関数であるから一般に関数形を定めることはできない⁸。よって一般に考えることができるのはここまでである。

さて、2 粒子が同種粒子であるとする。このとき粒子座標のいれかえ $r_1 \leftrightarrow r_2$ を行うと、重心・相対座 標は次のように変化する。

$$R \to R$$
 (7.38)

$$r \to -r$$
 (7.39)

重心座標は変化しないからそのままである。相対座標の部分は座標を反転する効果をもたらす。反転操作 を行ったとき、動径座標は大きさなので変化せず角度のみが次のように変化する。

$$(r,\theta,\varphi) \to (r,\pi-\theta,\varphi+\pi)$$
 (7.40)

⁸角度に関する量子数 ℓ に依存するが m によらないことはいえる。

よって、座標のいれかえによる変化は波動関数の中の球面調和関数の部分を調べればよい。球面調和関数 はVに依存しないから、中心力の系で一般に成り立つ性質を導くことができる。座標変換 (7.40) 式の下で 球面調和関数は

$$Y_{\ell,m}(\theta,\varphi) \to Y_{\ell,m}(\pi-\theta,\varphi+\pi) = (-1)^{\ell} Y_{\ell,m}(\theta,\varphi)$$
(7.41)

のように変化する。つまり、中心力ポテンシャルで相互作用する2粒子系において、波動関数の座標のいれかえに対する変化は量子数ℓによって決められる。状態は一般に固有関数の線形結合で表される。粒子がBose粒子であるとするとℓは偶数、Fermi粒子であるとするとℓは奇数でなければならないことになる。 これが量子統計による帰結である。

実際の系ではもう少し複雑である。多くの粒子はスピンの自由度をもっている。このような座標とは異なる内部自由度をもつ場合、それらの対称性も合わせて考えなければならない。例えば、それぞれの粒子がスピン 1/2 をもつとしよう。スピン 1/2 をもつ粒子は基本的に Fermi 粒子であるので、ここでは二つの Fermi 粒子の系を考えよう⁹。よって、粒子の座標のいれかえに従って波動関数は符号を変える。粒子はスピンをもつため、その部分の自由度もまた考慮しなければならない。ハミルトニアンがスピンによらないということは、ハミルトニアンの状態への作用はスピン状態によらずに決まる¹⁰。スピンの状態をどのようにとろうともエネルギーには影響しないので、統計性を考慮しない場合にはスピン状態は任意のものとなる。それぞれの粒子はスピンについて 2 通りの状態をとり、それらを $|+\rangle$ 、 $|-\rangle$ とする。つまり、スピン 演算子を S として次の関係が成り立つ。

$$\hat{S}^2 |\pm\rangle = \frac{3}{4} \hbar^2 |\pm\rangle \tag{7.42}$$

$$\hat{S}^{z}|\pm\rangle = \pm \frac{\hbar}{2}|\pm\rangle \tag{7.43}$$

2粒子のスピン状態は次の4通りの状態をもつ。

$$|++\rangle = |+\rangle_1|+\rangle_2 \tag{7.44}$$

$$|+-\rangle = |+\rangle_1|-\rangle_2 \tag{7.45}$$

$$|-+\rangle = |-\rangle_1|+\rangle_2 \tag{7.46}$$

$$|--\rangle = |-\rangle_1 |-\rangle_2 \tag{7.47}$$

添字はそれぞれのスピン空間における状態であることを示している。

量子統計の問題に戻って粒子の座標のいれかえによる対称性を考えてみよう。座標というのはスピンも 含むから例えば |+-> は |-+> におきかわる。つまり上の4状態では2番目と3番目の状態が異なる状態 に変化してしまって量子統計による要請を満たしていない。そこで、状態は任意の基底を用いて表現でき るという性質を利用して次の状態を新たに基底として取り直そう。

$$|1,1\rangle = |++\rangle \tag{7.48}$$

$$|1,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+-\rangle + |-+\rangle)$$
 (7.49)

$$|1, -1\rangle = |--\rangle \tag{7.50}$$

$$|0,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+-\rangle - |-+\rangle)$$
 (7.51)

ハミルトニアンはスピンによらないから、スピン状態をどのようにとろうとも自由である。このように選んだ状態に対して最初の3つは対称、最後の4つ目のみが反対称となる。よってこのようにとれば量子統計の要請に従って状態を考えることができる。|1,1>といった書き方を用いたのは、これらの状態が合成ス

⁹相対論的場の量子論を用いると、スピンと統計性の関係が明らかになる。Fermi 粒子は半整数、Bose 粒子は整数のスピンをもつことが示される。

 $^{^{10}}$ スピン 1/2 の系ではスピン部分の Hilbert 空間の次元は 2 なので、ハミルトニアン \hat{H} は $\hat{H}\otimes\hat{I}_2$ のように拡張される。 \hat{I}_2 は 2 次元スピン空間における単位演算子を表している。詳しくは第 12 章参照。

ピン $S = S_1 + S_2$ についての固有状態を表しているからである。

$$\hat{\boldsymbol{S}}^2|S,M\rangle = S(S+1)\hbar^2|S,M\rangle \tag{7.52}$$

$$\hat{S}^{z}|S,M\rangle = M\hbar|S,M\rangle \tag{7.53}$$

S = 1の状態が対称、S = 0が反対称である。

スピン部分の対称性が明らかになったので全体の状態の対称性を決めることができる。今考えているの は二つの Fermi 粒子であるので、粒子の座標の読みかえによって符号を変える。軌道座標の部分は $(-1)^{\ell}$ の変化をし、スピン部分は $(-1)^{S+1}$ となる。 ℓ は非負の整数、S は 0 か 1 を表す。よって、許される状態は

- 軌道角運動量 ℓ 偶数、合成スピンS=0
- 軌道角運動量ℓ 奇数、合成スピン *S* = 1

のどちらかである。

このようにして同種粒子の性質を考慮するととりうる状態が制限される。多体系における対称性・反対 称性の効果は以降の章でも扱う。



図 7.3: 同種粒子1と2が地球 e と太陽 s のつくるポテンシャル中を運動する。地球と太陽は静止している とし、地球の位置を原点にとる。

7.4 問題

$[\mathbf{A}]$

[7-1] 遠方の同種粒子

二つの同種粒子がそれぞれ地球と太陽の付近にあるとする。地球と太陽が静止しているとして、地球がつくるポテンシャルを $U_{\rm e}(\mathbf{r})$ 、太陽がつくるポテンシャルを $U_{\rm s}(\mathbf{r}-\mathbf{R})$ とする。図 7.3 のように座標をとる。

(a). 2 粒子のハミルトニアンを書き下せ。上記のポテンシャル以外の力ははたらかないとする。

地球と太陽が十分離れていてそれぞれのつくるポテンシャルはもう一方の近くで無視できるとする。ポテンシャル $U_{\rm e}(\mathbf{r})$ のときの1粒子問題の固有関数を $\phi_n(\mathbf{r})$ 、 $U_{\rm s}(\mathbf{r})$ のときの固有関数を $\tilde{\phi}_m(\mathbf{r})$ とする。

(b). (n,m) によって指定される状態の波動関数を書き下せ。

(c). 地球上の粒子の状態が $|\psi\rangle$ 、太陽上の粒子の状態が $|\tilde{\psi}\rangle$ であるとすれば、地球上の粒子が固有状態 n にある確率は $|\langle \phi_n | \psi \rangle|^2$ で与えられる。同種粒子性を考慮すれば波動関数を対称/反対称化しなければならないが、その効果は無視できることを式を用いて説明せよ。

[7-2] 同種粒子の散乱

同種粒子の散乱を考える。2粒子の重心座標系で見たとき、対称性を考慮しない波動関数は

$$\psi(\mathbf{r}) = e^{ikz} + f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r}$$
(7-2.1)

と書ける。第1項が入射粒子の平面波、第2項が散乱粒子の球面波である。f(θ)が散乱振幅を表す。

(a). 対称性を考慮したときの波動関数を求めよ。

(b). 2 粒子が Bose/Fermi 粒子のとき、 $\theta = \frac{\pi}{2}$ の微分散乱断面積が統計性を考慮しないときと比べてどのように変化するかをそれぞれ調べよ。

(c). 2 粒子が Fermi 粒子でスピン自由度をもつとする。入射粒子のスピンが偏極していないときは、それぞれの状態は等確率で生じる。このときの微分散乱断面積を求めよ。

[7-3] 2 粒子系の波動関数

それぞれがスピン1/2の自由度をもつ2粒子の系を考える。ハミルトニアンは次のように与えられる。

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left(\hat{p}_1^2 + \hat{p}_2^2 \right) + V(|\hat{r}_1 - \hat{r}_2|) - J\hat{S}_1 \cdot \hat{S}_2$$
(7-3.1)

 $\hat{S}_{1,2}$ は各粒子のスピン演算子、 $V(|m{r}|)$ は粒子間の距離によって決まる相互作用ポテンシャル、Jは定数とする。

(a). 定常状態の Schrödinger 方程式が座標およびスピンについて分離できることを確認せよ。

(b). スピン部分の固有値・固有状態を全て求めよ。

(c). 2 粒子が同種 Fermi 粒子とする。スピン自由度の固有関数が与えられたとき、座標部分の波動関数 にどのような制限がつくか調べよ。

[7-4] ヘリウム原子

ヘリウム原子は2つの電子とZ=2の原子核からなり、電子間相互作用のエネルギーが生じる。原子核 を原点に固定した座標系でハミルトニアンは次のように与えられる。

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left(\hat{p}_1^2 + \hat{p}_2^2 \right) - \frac{2\hbar^2}{ma_{\rm B}} \left(\frac{1}{\hat{r}_1} + \frac{1}{\hat{r}_2} \right) + \frac{\hbar^2}{ma_{\rm B}} \frac{1}{|\hat{r}_1 - \hat{r}_2|}$$
(7-4.1)

最後の電子間相互作用の項を摂動として扱う。摂動の1次近似を用いて以下の問いに答えよ。計算の繁雑 さを避けるため、角運動量の量子数ℓが0の状態のみを考えることにする。

(a). 基底状態のエネルギーを求めよ。

(b). 第1励起状態(ただし、 $\ell = 0$ のみを考えたときのもの)のエネルギーの表式を求めよ。積分を計算する必要はない。

(c). $\rho(\mathbf{r})$ を無限遠点で十分早く0になる複素関数とする。次の式を示せ。

$$\nabla_{r_1}^2 \int d^3 r_2 \frac{\rho(r_2)}{|r_1 - r_2|} = -4\pi\rho(r_1)$$
(7-4.2)

$$\int d^3 \boldsymbol{r}_1 d^3 \boldsymbol{r}_2 \, \frac{\rho(\boldsymbol{r}_1)\rho^*(\boldsymbol{r}_2)}{|\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2|} \ge 0 \tag{7-4.3}$$

(d). 電子はスピン 1/2 をもつ Fermi 粒子である。このとき、基底状態と第1 励起状態のスピンの状態を 求めよ。 [7-5] 調和振動子ポテンシャル中の Fermi 粒子

3次元調和振動子ポテンシャル中の同種 Fermi 粒子を考える。

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^{N} \left(\frac{1}{2m} \hat{p}_i^2 + \frac{m\omega^2}{2} \hat{r}_i^2 \right)$$
(7-5.1)

粒子間に相互作用ははたらかない。スピン自由度ももたないとする。

(a). 1 粒子エネルギー準位は

$$E_n = \left(n + \frac{3}{2}\right)\hbar\omega\tag{7-5.2}$$

と書ける。n は非負の整数を表す。それぞれの準位の縮退度を求めよ。

(b). N = 1,2,3,4の粒子数の系の基底状態を考える。それぞれの基底状態とエネルギーを求めよ。

(c). 縮退がない基底状態はどのようなものか。また、それらの状態について、粒子数とエネルギーをそれぞれ求めよ。

$[\mathbf{C}]$

[7-6]1次元デルタ関数ポテンシャル

次のハミルトニアンの1次元2粒子系を考える。スピン自由度はもたないとする。

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left(\hat{p}_1^2 + \hat{p}_2^2 \right) + g\delta(\hat{x}_1 - \hat{x}_2) \tag{7-6.1}$$

また、周期境界条件 $\psi(L, x_2) = \psi(0, x_2)$ 、 $\psi(x_1, L) = \psi(x_1, 0)$ を課す。

(a). 2 粒子が Bose 統計に従うとき、系の波動関数を定め、エネルギーを決定する方程式を求めよ。

(b). Fermi 統計に従う場合を考え、(a) で $g \rightarrow \infty$ としたときの解と比較せよ。
第8章 場の演算子と量子化

前章では同種粒子の基本的な性質について議論した。粒子は Bose 粒子と Fermi 粒子に分類され、波動関数は粒子の座標のいれかえについてそれぞれ対称・反対称でなければならない。第 II 部で議論する性質は基本的にはそれに尽きているのだが、粒子が区別可能であるとして波動関数を求めておいてから見分けがつかないことをとりいれるという手順は無駄に思える。始めから粒子が識別できないことをとりいれた記述の方法があるとよい。本章では、場の演算子を導入することによって量子統計の性質を記述する。場の演算子を導入することはただの手法にはとどまらない意義があり、それについても議論する。

8.1 場の演算子

8.1.1 状態の表現

上の前書きでも述べたように、粒子が区別できないことはこれまでとは異なる状態の表現ができること を示唆している。例えば、N 粒子が相互作用していない系を考えると、前章で見たように、それぞれの粒 子の状態は固有値方程式を解くことでわかり、1 粒子状態は適当な量子数n で特徴づけられる。N 粒子が それぞれ状態 n_1, n_2, \ldots, n_N にあるという表現は各粒子に立脚した見方であり、これがそもそもよくない。 そこでこの見方を変えて、1 粒子状態1 にある粒子が N_1 個、2 にある数が N_2 個、… というように考えて みよう。つまり、状態を次のように占有数を用いて表す。

$$|\psi\rangle = |N_1, N_2, \ldots\rangle \tag{8.1}$$

1 粒子状態は無限にあるので状態を特徴づけるには無限に続く非負の整数の組が必要になってしまうが、粒子の区別は全くされていないためこの表現が適切である。

対応する波動関数は状態を座標表示をすることで得られる。例えば、(*n*₁, *n*₂, *n*₃,...) = (1,0,0,...)の1 粒子状態の波動関数は

$$\psi_{1,0,0,\dots}(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} | 1, 0, 0, \dots \rangle$$
 (8.2)

と書ける。 $|r\rangle$ は座標の固有状態であり

$$\hat{\boldsymbol{r}}|\boldsymbol{r}
angle = \boldsymbol{r}|\boldsymbol{r}
angle$$

$$\tag{8.3}$$

を満たす。連続無限の Hilbert 空間上で定義されたベクトルであり、規格化することができないが、デルタ 関数を用いて

$$\langle \boldsymbol{r} | \boldsymbol{r}' \rangle = \delta^3 (\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}') \tag{8.4}$$

とする。

これを N 粒子系に拡張したもの $|r_1, r_2, \ldots, r_N\rangle$ は、粒子が r_1, r_2, \ldots, r_N に存在する状態を表している。 粒子の区別がつかないことを反映して、座標のいれかえに対して

$$|\mathbf{r}_1,\ldots,\mathbf{r}_i,\ldots,\mathbf{r}_j,\ldots,\mathbf{r}_N\rangle = \pm |\mathbf{r}_1,\ldots,\mathbf{r}_j,\ldots,\mathbf{r}_i,\ldots,\mathbf{r}_N\rangle$$
(8.5)

という関係を課す。上の議論から考えるとrに粒子が N_r 個、r'に粒子が $N_{r'}$ 個、… というようにしたいところであるが、場所は連続無限に指定できるのでこのように書くことができない。したがって、N個の

座標で状態を表す。占有数表示との関係はもう少し後で議論することにする。この状態に対する直交性は、 例えば2粒子の系を考えてみると、

$$\langle \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 | \mathbf{r}_1', \mathbf{r}_2' \rangle = \delta^3(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_1') \delta^3(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_2') \pm \delta^3(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2') \delta^3(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1')$$
(8.6)

となる¹。座標のいれかえに対する対称性を保つために、右辺は二つの項が必要とされる。これはつまり、

$$|\boldsymbol{r}_{1},\boldsymbol{r}_{2}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\boldsymbol{r}_{1}\rangle_{1}|\boldsymbol{r}_{2}\rangle_{2} \pm |\boldsymbol{r}_{2}\rangle_{1}|\boldsymbol{r}_{1}\rangle_{2}\right)$$
(8.7)

と書けることを示唆している。 $|r\rangle_{1,2}$ はぞれぞれの粒子の座標固有状態を表す。状態は二種類の Hilbert 空間の状態の直積で表される。ただし、右辺の表現は粒子が区別できるとした場合のものであるから、以下で具体的に用いることはしない。また、このように書くと、 $|r_1, r_2\rangle$ 自体は各座標の固有状態ではないことがわかる²。

直交性を任意の粒子数の場合へ一般化すると

$$\langle \boldsymbol{r}_1, \dots, \boldsymbol{r}_N | \boldsymbol{r}'_1, \dots, \boldsymbol{r}'_N \rangle = \sum_{\mathrm{P}} (\pm 1)^{\mathrm{P}} \prod_{i=1}^N \delta^3 \left(\boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{r}'_{\mathrm{P}(i)} \right)$$
(8.8)

と書ける。Pは座標の並べ方についての組み合わせを表す。項数は N! である。

8.1.2 場の演算子

場の演算子 (field operator)を次のように定義しよう。

$$\hat{\psi}^{\dagger}(\boldsymbol{r}) = |\boldsymbol{r}\rangle\langle 0| + \sum_{N=1}^{\infty} \frac{1}{N!} \int d^{3}\boldsymbol{r}_{1} \cdots d^{3}\boldsymbol{r}_{N} |\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}_{1}, \dots, \boldsymbol{r}_{N}\rangle\langle \boldsymbol{r}_{1}, \dots, \boldsymbol{r}_{N}|$$
(8.9a)

$$= |\mathbf{r}\rangle\langle 0| + \int d^{3}\mathbf{r}_{1} |\mathbf{r}, \mathbf{r}_{1}\rangle\langle \mathbf{r}_{1}| + \frac{1}{2}\int d^{3}\mathbf{r}_{1}d^{3}\mathbf{r}_{2} |\mathbf{r}, \mathbf{r}_{1}, \mathbf{r}_{2}\rangle\langle \mathbf{r}_{1}, \mathbf{r}_{2}| + \cdots$$
(8.9b)

これは、任意の状態に作用させることで粒子をひとつ増やす演算子である。つまり、

$$\hat{\psi}^{\dagger}(\boldsymbol{r})|\boldsymbol{r}_{1},\ldots,\boldsymbol{r}_{N}\rangle = |\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}_{1},\ldots,\boldsymbol{r}_{N}\rangle$$
(8.10)

と書ける。 $\hat{\psi}^{\dagger}(\mathbf{r})$ は座標点 \mathbf{r} に粒子を生成させる演算子を表す。式 (8.9) において 1/N! の係数が必要なことは、 $(\mathbf{r}_1,\ldots,\mathbf{r}_N)$ の並べ方が任意であることを反映している³。 $|0\rangle$ は粒子が存在しない状態で、以下で詳しく議論する。

 $\hat{\psi}^{\dagger}(m{r})$ は粒子を生成する演算子を表すが、共役な演算子

$$\hat{\psi}(\boldsymbol{r}) = |0\rangle\langle \boldsymbol{r}| + \sum_{N=1}^{\infty} \frac{1}{N!} \int d^{3}\boldsymbol{r}_{1} \cdots d^{3}\boldsymbol{r}_{N} |\boldsymbol{r}_{1}, \dots, \boldsymbol{r}_{N}\rangle\langle \boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}_{1}, \dots, \boldsymbol{r}_{N}|$$
(8.11)

は粒子を消滅させる演算子であることはすぐにわかる。例えば、

$$\hat{\psi}(\boldsymbol{r})|\boldsymbol{r}_{1},\ldots,\boldsymbol{r}_{N}\rangle = \sum_{i=1}^{N} (-1)^{i-1} \delta^{3}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_{i})|\boldsymbol{r}_{1},\ldots,\boldsymbol{r}_{i-1},\boldsymbol{r}_{i+1},\ldots,\boldsymbol{r}_{N}\rangle$$
(8.12)

という関係が得られる。 r_1, \ldots, r_N にある粒子のどれか一つを消滅させる。

このように定義される生成消滅演算子 (creation/annihilation operator) $\hat{\psi}^{\dagger}(\mathbf{r})$ 、 $\hat{\psi}(\mathbf{r})$ は粒子数を変化させる演算子である。粒子数の値が固定された状態空間 (Hilbert 空間)をつないで粒子数の変化も扱えるようにしたことがこれまでとの大きな違いである。これまでは、N 個の粒子がなくなることも増えること

 $^1(|m{r}_1,m{r}_2
angle)^\dagger=\langlem{r}_1,m{r}_2|$ であることに注意。共役をとるときに $m{r}_1,m{r}_2$ の並びをひっくりかえすことはしない。

 $^{^2}$ 座標の和 $\hat{r}_1 + \hat{r}_2$ の固有状態ではある。

 $^{^{3}}$ 式 (8.8)の直交性を用いると N! 個の項が生じる。並べかえによる符号因子 $(-1)^{P}$ は、再び元の並べ方に戻すことによってなくなる。

もないという前提の元で全ての議論を行ってきた。状態空間は粒子数一定の Hilbert 空間をつなぎあわせた もので表される。

$$|\Psi\rangle \in \{ |0\rangle, |\mathbf{r}_1\rangle, |\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2\rangle, |\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3\rangle, \dots \}$$

$$(8.13)$$

これを Fock 空間 (Fock space) という。粒子がひとつもない空間または粒子数1の空間または、… というように考えていた状態空間を、粒子がひとつもない空間かつ粒子数1の空間かつ、… に変えている。つまり、論理記号 OR が AND におきかわっている。粒子数が異なる状態が混在することになる。粒子数が異なる状態同士の内積は0とする。

$$\langle \boldsymbol{r}_1, \dots, \boldsymbol{r}_N | \boldsymbol{r}'_1, \dots, \boldsymbol{r}'_{N'} \rangle = \delta_{N,N'} \langle \boldsymbol{r}_1, \dots, \boldsymbol{r}_N | \boldsymbol{r}'_1, \dots, \boldsymbol{r}'_{N'} \rangle$$
(8.14)

Fock 空間の定義で重要な点は、粒子が一つもない状態 |0〉も含めて考えていることである。この状態を 真空(vacuum)とよぶ。文字通り何もない状態である⁴。何もないからどうでもよいように思えるが、生 成演算子を用いると、任意の状態は全て真空からつくりだすことができる⁵。

$$|\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N\rangle = \hat{\psi}^{\dagger}(\mathbf{r}_1) \cdots \hat{\psi}^{\dagger}(\mathbf{r}_N) |0\rangle \tag{8.15}$$

真空は全ての状態を作るための基礎となるから最も重要な状態である⁶。

状態から生成消滅演算子を定義したが、これらの演算子としての性質を調べてみよう。まず、二つの生 成演算子の積について

$$\hat{\psi}^{\dagger}(\boldsymbol{r})\hat{\psi}^{\dagger}(\boldsymbol{r}')|\boldsymbol{r}_{1},\ldots,\boldsymbol{r}_{N}\rangle = |\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}',\boldsymbol{r}_{1},\ldots,\boldsymbol{r}_{N}\rangle = \pm |\boldsymbol{r}',\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}_{1},\ldots,\boldsymbol{r}_{N}\rangle = \pm \hat{\psi}^{\dagger}(\boldsymbol{r}')\hat{\psi}^{\dagger}(\boldsymbol{r})|\boldsymbol{r}_{1},\ldots,\boldsymbol{r}_{N}\rangle \quad (8.16)$$

が成り立つ。これは任意の状態について成り立つので、状態を外しても演算子として成り立つ関係である。 つまり、

$$[\hat{\psi}^{\dagger}(\boldsymbol{r}), \hat{\psi}^{\dagger}(\boldsymbol{r}')]_{\mp} = 0 \tag{8.17}$$

を得る。ここで交換関係・反交換関係を次のように定義した。

$$[\hat{A},\hat{B}]_{\mp} = \hat{A}\hat{B} \mp \hat{B}\hat{A} \tag{8.18}$$

Bose 粒子・Fermi 粒子の順番にしていることに注意してほしい。つまり、Bose 粒子の場合には交換関係 (-)、Fermi 粒子の場合には反交換関係(+)が用いられる。生成演算子に対する交換関係の共役を考える と消滅演算子に対する交換関係が得られる。

$$[\hat{\psi}(\boldsymbol{r}), \hat{\psi}(\boldsymbol{r}')]_{\mp} = 0 \tag{8.19}$$

生成演算子と消滅演算子が混ざった場合も同様に考えられる。生成演算子を状態にかけてから消滅演算 子をかけると

$$\hat{\psi}(\boldsymbol{r})\hat{\psi}^{\dagger}(\boldsymbol{r}')|\boldsymbol{r}_{1},\ldots,\boldsymbol{r}_{N}\rangle = \hat{\psi}(\boldsymbol{r})|\boldsymbol{r}',\boldsymbol{r}_{1},\ldots,\boldsymbol{r}_{N}\rangle$$

$$= \delta^{3}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')|\boldsymbol{r}_{1},\ldots,\boldsymbol{r}_{N}\rangle \pm \delta^{3}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_{1})|\boldsymbol{r}',\boldsymbol{r}_{2},\ldots,\boldsymbol{r}_{N}\rangle$$

$$+\delta^{3}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_{2})|\boldsymbol{r}',\boldsymbol{r}_{1},\boldsymbol{r}_{3}\ldots,\boldsymbol{r}_{N}\rangle + \cdots$$
(8.20b)

となる。一方、演算の順番を逆にすると

$$\hat{\psi}^{\dagger}(\boldsymbol{r}')\hat{\psi}(\boldsymbol{r})|\boldsymbol{r}_{1},\ldots,\boldsymbol{r}_{N}\rangle = \delta^{3}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_{1})|\boldsymbol{r}',\boldsymbol{r}_{2},\ldots,\boldsymbol{r}_{N}\rangle \pm \delta^{3}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_{2})|\boldsymbol{r}',\boldsymbol{r}_{1},\boldsymbol{r}_{3}\ldots,\boldsymbol{r}_{N}\rangle + \cdots$$
(8.21)

⁴状態として存在するものであり、0とは異なる。

⁵真空の定義は後述する。

⁶例えば、超伝導のような特異な状態は非自明な真空を求める問題に帰着させることによって記述される。

である。両者を見比べると

$$[\hat{\psi}(\boldsymbol{r}), \hat{\psi}^{\dagger}(\boldsymbol{r}')]_{\mp} |\boldsymbol{r}_1, \dots, \boldsymbol{r}_N\rangle = \delta^3(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}') |\boldsymbol{r}_1, \dots, \boldsymbol{r}_N\rangle$$
(8.22)

となる。どのような状態に対しても成り立つから、演算子の関係

$$[\hat{\psi}(\boldsymbol{r}), \hat{\psi}^{\dagger}(\boldsymbol{r}')]_{\mp} = \delta^3(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}') \tag{8.23}$$

を得る。ここまで考えた(8.17)、(8.19)、(8.23)式で演算子の全ての性質が規定される。

全ての状態は真空から (8.15) 式のように定義できるが、真空をどのように定義するか述べていなかった。 真空は粒子をひとつも含んでいないのであるから、そのことを表現した

$$\hat{\psi}(\boldsymbol{r})|0\rangle = 0 \tag{8.24}$$

が真空の定義となる。また、真空は規格化されているとする。

$$\langle 0|0\rangle = 1 \tag{8.25}$$

真空を定義してしまえば任意の状態を生成演算子を用いて表現することができて直交性のいろいろな計算 は演算子の交換関係を用いて示すことができる。例えば、

$$\langle \boldsymbol{r} | \boldsymbol{r}' \rangle = \delta^3 (\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}') \tag{8.26}$$

であるが、演算子の交換関係を用いると

$$\langle \boldsymbol{r} | \boldsymbol{r}' \rangle = \langle 0 | \hat{\psi}(\boldsymbol{r}) \hat{\psi}^{\dagger}(\boldsymbol{r}') | 0 \rangle = \langle 0 | \left(\delta^{3}(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}') \pm \hat{\psi}^{\dagger}(\boldsymbol{r}') \hat{\psi}(\boldsymbol{r}) \right) | 0 \rangle = \delta^{3}(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}') \langle 0 | 0 \rangle = \delta^{3}(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}') \quad (8.27)$$

と計算できる。

生成消滅演算子を定義したが、Bose 粒子の場合は調和振動子のときに導入したものとよく似ている。ただし、そのときは (8.23) 式の右辺に対応するものはデルタ関数ではなく Kronecker のデルタが用いられていた。それらの関係については次節で議論する。

ここまで考えた状態は座標演算子の固有状態であった。状態が完全系をなせば一般的な状態も座標の固 有状態の線形結合で表現することができる。その係数は波動関数を表す。例えば、1 粒子系では状態 $|\psi\rangle$ を $|r\rangle$ で展開したときの係数 $\psi(r) = \langle r | \psi \rangle$ は波動関数を表す。これを一般化すると N 粒子状態 $|\psi\rangle$ の座標表 示を表す波動関数は

$$\psi(\boldsymbol{r}_1,\ldots,\boldsymbol{r}_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \langle \boldsymbol{r}_1,\ldots,\boldsymbol{r}_N | \psi \rangle$$
(8.28)

と書ける7。波動関数が規格化されていることは次の完全性関係から示される(問題[8-1])。

$$|0\rangle\langle 0| + \sum_{N=1}^{\infty} \frac{1}{N!} \int d^3 \boldsymbol{r}_1 \cdots d^3 \boldsymbol{r}_N | \boldsymbol{r}_1, \dots, \boldsymbol{r}_N \rangle \langle \boldsymbol{r}_1, \dots, \boldsymbol{r}_N | = 1$$
(8.29)

8.1.3 物理量の表現

前節で場の演算子を定義したが、この演算子自体は物理量を表すものではない。これまでに扱ってきた 演算子を場の演算子を用いて表現することを考えよう。まず、基本となる演算子を定義する。

$$\hat{n}(\boldsymbol{r}) = \hat{\psi}^{\dagger}(\boldsymbol{r})\hat{\psi}(\boldsymbol{r})$$
(8.30)

 $^{^7}$ 状態 $|\pmb{r}_1,\ldots,\pmb{r}_N\rangle$ を(8.15)式のように定義すると規格化定数 $1/\sqrt{N!}$ が必要となる。文献によっては規格化定数を $|\pmb{r}_1,\ldots,\pmb{r}_N\rangle$ に含めて定義することもあるので注意されたい。

調和振動子の場合、消滅演算子の後に生成演算子をかけることはエネルギー準位を表す非負の整数nを表していた。今の場合も同様の性質を表しているだろう。状態 $|r_1,\ldots,r_N
angle$ にかけてみると

$$\hat{n}(\boldsymbol{r})|\boldsymbol{r}_{1},\ldots,\boldsymbol{r}_{N}\rangle = \hat{\psi}^{\dagger}(\boldsymbol{r})\Big(\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_{1})|\boldsymbol{r}_{2},\ldots,\boldsymbol{r}_{N}\rangle \pm \delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_{2})|\boldsymbol{r}_{1},\boldsymbol{r}_{3},\ldots,\boldsymbol{r}_{N}\rangle + \cdots\Big) \quad (8.31a)$$

$$= \sum_{i=1}^{N} \delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_i) | \boldsymbol{r}_1, \dots, \boldsymbol{r}_N \rangle$$
(8.31b)

つまり、演算子 $\hat{n}(r)$ は座標 r にある粒子の密度を測っている。積分した演算子

$$\hat{N} = \int d^3 \boldsymbol{r} \, \hat{n}(\boldsymbol{r}) \tag{8.32}$$

は粒子数演算子を表す。

$$\hat{N}|\boldsymbol{r}_1,\ldots,\boldsymbol{r}_N\rangle = N|\boldsymbol{r}_1,\ldots,\boldsymbol{r}_N\rangle$$
(8.33)

消滅演算子をかけてから生成消滅演算子をかけることが粒子を数えることを意味しているのは次のよう に考えればわかる。消滅演算子で粒子を消滅させるためにはそこに粒子がなければならない。消滅演算子 をかけた後に生成演算子をかけると消した粒子が作り直される。 $\hat{n}(r)$ は場所 r に粒子があるかどうかを調 べる演算子であることが理解できる。

他の演算子も同様にして考えることができる。例えば、座標に依存する1粒子演算子 $U_1(\hat{r})$ の同種粒子系における表現を考えてみよう。N粒子の系では $\hat{U}_N = \sum_{i=1}^N U_1(\hat{r}_i)$ と書くことができる。このとき、

$$\langle \boldsymbol{r}_1, \dots, \boldsymbol{r}_N | \hat{U}_N = \sum_{i=1}^N U_1(\boldsymbol{r}_i) \langle \boldsymbol{r}_1, \dots, \boldsymbol{r}_N |$$
(8.34)

となる。上で定義した密度演算子の構成を参照すると、 \hat{U}_N を場の演算子を用いて表すには次のようにすればよいことがわかる。

$$\hat{U} = \int d^3 \boldsymbol{r} \, \hat{\psi}^{\dagger}(\boldsymbol{r}) U_1(\boldsymbol{r}) \hat{\psi}(\boldsymbol{r})$$
(8.35)

右辺の $U_1(\mathbf{r})$ は演算子ではなくふつうの c 数関数を表している。この演算子が N 粒子の系では $\hat{U}_N = \sum_{i=1}^N U_1(\hat{\mathbf{r}}_i)$ と同じであることを示すには (8.34) 式と同じ式を考えてみればよい。全く同じ関係を導くことがわかる。ただし、場の演算子を用いた \hat{U} の表現では粒子数の値は確定していない。粒子数の情報はこの演算子が作用する状態にのみ入っている。どのような粒子数の系を考えても同じ演算子を用いることができる。

同様に考えると、

$$\hat{\boldsymbol{P}} = \int \mathrm{d}^{3}\boldsymbol{r}\,\hat{\psi}^{\dagger}(\boldsymbol{r})\frac{\hbar}{i}\boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{r}}\hat{\psi}(\boldsymbol{r})$$
(8.36)

と定義される演算子は

$$\langle \boldsymbol{r}, \dots, \boldsymbol{r}_N | \hat{\boldsymbol{P}} = \sum_{i=1}^N \frac{\hbar}{i} \boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{r}_i} \langle \boldsymbol{r}, \dots, \boldsymbol{r}_N |$$
(8.37)

であるから、運動量演算子の和を表している。相互作用しない同種 N 粒子系のハミルトニアン

$$\hat{H}_N = \sum_{i=1}^N \left(\frac{\hat{p}_i^2}{2m} + U_1(\boldsymbol{r}_i) \right)$$
(8.38)

は、場の演算子を用いると

$$\hat{H} = \int d^3 \boldsymbol{r} \, \hat{\psi}^{\dagger}(\boldsymbol{r}) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \boldsymbol{\nabla}^2 + U_1(\boldsymbol{r}) \right) \hat{\psi}(\boldsymbol{r})$$
(8.39)

と表すことができる。

複数の粒子に作用する演算子の場合はどうなるだろうか。例えば、2体相互作用のポテンシャルは通常

$$\hat{V}_N = \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j=1\\(i\neq j)}}^N V_2(|\hat{\boldsymbol{r}}_i - \hat{\boldsymbol{r}}_j|)$$
(8.40)

と書ける。このようなときは、関係する座標は二つ必要であるから (8.35) 式のように書くことはできない。 次のようにすればよい。

$$\hat{V} = \frac{1}{2} \int \mathrm{d}^3 \boldsymbol{r} \mathrm{d}^3 \boldsymbol{r}' \, \hat{\psi}^{\dagger}(\boldsymbol{r}) \hat{\psi}^{\dagger}(\boldsymbol{r}') V_2(|\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}'|) \hat{\psi}(\boldsymbol{r}') \hat{\psi}(\boldsymbol{r})$$
(8.41)

演算子の順番に注意してほしい。生成演算子が $\hat{\psi}^{\dagger}(\mathbf{r})\hat{\psi}^{\dagger}(\mathbf{r}')$ と並んでいるとき、消滅演算子は引数の順番 を逆にして $\hat{\psi}(\mathbf{r}')\hat{\psi}(\mathbf{r})$ となっている。演算子の交換関係を用いて (8.30) 式の密度を用いて表現することも できる。

$$\hat{V} = \frac{1}{2} \int \mathrm{d}^3 \boldsymbol{r} \mathrm{d}^3 \boldsymbol{r}' \left(\hat{n}(\boldsymbol{r}) V_2(|\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}'|) \hat{n}(\boldsymbol{r}') - \delta^3(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}') V_2(|\boldsymbol{0}|) \hat{n}(\boldsymbol{r}) \right)$$
(8.42)

第1項は点rにある密度で存在する粒子がr'の粒子と相互作用する寄与を取り出すものであり、理解しやすい。第2項は演算子の非可換性により生じる寄与で第1項から同じ点に粒子が存在するときの寄与を引き去る役割を果たしていると解釈できる。ただし、Fermi粒子であれば自然な性質に思えるが、この関係はBose粒子でも成り立つことに注意してほしい。いずれにしろ、量子性により生じる項であることは間違いない。

2体相互作用の項の例を理解すればどんな演算子も同様にして表現できることがわかるはずである。特徴はk体相互作用する項は生成消滅演算子をそれぞれk個必要とすることである。物理量をはかるためにかける演算によって状態が変化してはいけないので $\hat{\psi}^{\dagger}(\mathbf{r})$ と $\hat{\psi}(\mathbf{r})$ は対であらわれる。あらわれる対の数が相互作用の性質を表している。k個の対がある場合にはk体の相互作用を表す。例えば3体相互作用は

$$\hat{V} = \frac{1}{3!} \int \mathrm{d}^3 \boldsymbol{r} \mathrm{d}^3 \boldsymbol{r}' \mathrm{d}^3 \boldsymbol{r}'' \,\hat{\psi}^{\dagger}(\boldsymbol{r}) \hat{\psi}^{\dagger}(\boldsymbol{r}') \hat{\psi}^{\dagger}(\boldsymbol{r}'') V_3(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}', \boldsymbol{r}'') \hat{\psi}(\boldsymbol{r}'') \hat{\psi}(\boldsymbol{r}') \hat{\psi}(\boldsymbol{r})$$
(8.43)

と書ける。*V*₃は3つの引数の任意の組のいれかえについて対称な関数を表す。

8.1.4 生成消滅演算子

相互作用のないハミルトニアンを考える。このときのハミルトニアンは前節で得たように

$$\hat{H} = \int \mathrm{d}^3 \boldsymbol{r} \, \hat{\psi}^{\dagger}(\boldsymbol{r}) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \boldsymbol{\nabla}^2 + U_1(\boldsymbol{r}) \right) \hat{\psi}(\boldsymbol{r}) \tag{8.44}$$

と書ける。これまでの解析では、与えられたハミルトニアンに対して固有値問題を解くことで1粒子状態 を求めていた。固有値方程式は

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\boldsymbol{\nabla}^2 + U_1(\boldsymbol{r})\right)\phi_n(\boldsymbol{r}) = \epsilon_n\phi_n(\boldsymbol{r})$$
(8.45)

と書ける。得られる固有関数は正規直交性を満たし1粒子ハミルトニアン演算子が定義されている Hilbert 空間で完全系をなす。

この固有関数を用いて場の演算子を展開することを考える。

$$\hat{\psi}(\boldsymbol{r}) = \sum_{n} \hat{a}_{n} \phi_{n}(\boldsymbol{r}) \tag{8.46}$$

演算子の展開であるから係数 ân は演算子を表す。固有関数の正規直交性を用いると

$$\hat{a}_n = \int \mathrm{d}^3 \boldsymbol{r} \, \phi_n^*(\boldsymbol{r}) \hat{\psi}(\boldsymbol{r}) \tag{8.47}$$

と表すことができる。

演算子 \hat{a}_n の性質を調べるために交換関係を考えよう。 \hat{a}_n は $\hat{\psi}(\mathbf{r})$ の線形結合で書けるので、前者の交換 関係は後者のものから導かれる。簡単な計算で次の性質がわかる。

$$[\hat{a}_m, \hat{a}_n]_{\mp} = 0 \tag{8.48}$$

$$[\hat{a}_m^{\dagger}, \hat{a}_n^{\dagger}]_{\mp} = 0 \tag{8.49}$$

もう1種類の交換関係は次のように計算される。

$$[\hat{a}_m, \hat{a}_n^{\dagger}]_{\mp} = \int \mathrm{d}^3 \boldsymbol{r} \mathrm{d}^3 \boldsymbol{r}' \,\phi_m^*(\boldsymbol{r}) \phi_n(\boldsymbol{r}') [\hat{\psi}(\boldsymbol{r}), \hat{\psi}^{\dagger}(\boldsymbol{r}')]_{\mp} = \int \mathrm{d}^3 \boldsymbol{r} \,\phi_m^*(\boldsymbol{r}) \phi_n(\boldsymbol{r}) = \delta_{m,n} \tag{8.50}$$

これらが演算子 \hat{a}_n の性質を規定する。

Bose 粒子のときに得られる演算子の関係は、調和振動子のときに用いられた昇降演算子のものと全く同 じである⁸。調和振動子のときは昇降演算子 \hat{a}^{\dagger} 、 \hat{a} がそれぞれ一つずつ定義され、 \hat{a}^{\dagger} がエネルギーを $\hbar\omega$ だ け増やし、 \hat{a} が $\hbar\omega$ だけ減らす役割を果たす。今の場合は、 \hat{a}_{n}^{\dagger} (\hat{a}_{n})によって 1 粒子エネルギー ϵ_{n} をもつ 粒子が生成 (消滅) される。この対応より、固有状態 i を N_{i} 個 (i = 1, 2, ...) 占めている系の状態は

$$|N_1, N_2, \ldots\rangle = \frac{1}{\sqrt{N_1! N_2! \cdots}} (\hat{a}_1^{\dagger})^{N_1} (\hat{a}_2^{\dagger})^{N_2} \cdots |0\rangle$$
(8.51)

と書けることが直ちにわかる。真空は消滅演算子をかけて0になるものとして定義される。

$$\hat{u}_n|0\rangle = 0 \tag{8.52}$$

例えば一粒子固有状態 n をとる状態の波動関数は

$$\langle \boldsymbol{r}|n\rangle = \langle 0|\hat{\psi}(\boldsymbol{r})\hat{a}_{n}^{\dagger}|0\rangle = \sum_{m} \phi_{m}(\boldsymbol{r})\langle 0|\hat{a}_{m}\hat{a}_{n}^{\dagger}|0\rangle = \phi_{n}(\boldsymbol{r})$$
(8.53)

と計算される。確かに固有関数 $\phi_n(\mathbf{r})$ が波動関数として得られる。

自由粒子の系では固有関数 $\phi_n(\mathbf{r})$ は平面波 $e^{i\mathbf{k}_n\cdot\mathbf{r}}$ で与えられる。このときの $\hat{\psi}(\mathbf{r})$ と \hat{a}_n の関係は Fourier 変換に他ならない。Fourier 変換は任意の完全性をなす固有関数系に一般化することができるから、ここで 考えた演算子間の変換は表示の変更にすぎない。 $\hat{\psi}(\mathbf{r})$ が座標表示、 \hat{a}_n が 1 粒子固有状態表示である。本 講義ノートでは $\hat{\psi}(\mathbf{r})$ を定義してから \hat{a}_n を定義したが、逆に定義してもよい。そのようにする教科書も多 い。 $\hat{\psi}(\mathbf{r})$ を先に定義したのは、 \hat{a}_n を定義するために用いる波動関数 $\phi_n(\mathbf{r})$ がハミルトニアンに依存する からということと、以下で議論するように、 $\hat{\psi}(\mathbf{r})$ が「場」の演算子として重要な意味をもつからである⁹。

8.1.5 場の演算子の意味

前節まででも議論してきたように、場の演算子、生成消滅演算子を用いるとハミルトニアンなどの演算 子を粒子数によらない表現にすることができる。また、状態も占有数表示を自然なものとして表すことが できる。場の演算子の意義についてもう少し考えてみよう。これは次節で考える場の量子化につながって いく問題である。

ここまで場の演算子には時間依存性は入っていなかったが、Heisenberg 描像では演算子は時間に依存する。そのときの場の演算子は

$$\hat{\psi}(\boldsymbol{r},t) = \mathrm{e}^{i\hat{H}t/\hbar}\hat{\psi}(\boldsymbol{r})\mathrm{e}^{-i\hat{H}t/\hbar} \tag{8.54}$$

と定義される。これは当然 Heisenberg の運動方程式を満たす。

$$i\hbar \frac{\partial \hat{\psi}(\boldsymbol{r},t)}{\partial t} = [\hat{\psi}(\boldsymbol{r},t), \hat{H}]$$
(8.55)

⁸Fermi 粒子の場合は問題 [8-3] を参照。

 $^{^9}$ 経路積分を定式化するときにも $\hat{\psi}(m{r})$ を用いる。

ハミルトニアンとして相互作用のない系を考えると、Heisenberg 描像で

$$\hat{H} = \int \mathrm{d}^3 \boldsymbol{r} \, \hat{\psi}^{\dagger}(\boldsymbol{r}, t) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \boldsymbol{\nabla}^2 + U_1(\boldsymbol{r}) \right) \hat{\psi}(\boldsymbol{r}, t) \tag{8.56}$$

と書くことができる。このとき、運動方程式は次のようになる。

$$i\hbar \frac{\partial \hat{\psi}(\boldsymbol{r},t)}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\boldsymbol{\nabla}^2 + U_1(\boldsymbol{r})\right)\hat{\psi}(\boldsymbol{r},t)$$
(8.57)

これは Schrödinger 方程式と全く同じ形をしている。波動関数の代わりに場の演算子が用いられている。

このように見ると、本節で用いている場の演算子を用いた表現は波動関数を演算子化したように見える。 そのため、場の演算子の導入はしばしば第二量子化(second quantization)とよばれる。運動量を微分演 算子におきかえるなどの操作を第一量子化とすれば、多体系を表すためにもう一回量子化しているという 意味を込めている。ところが、これまでの導出をふりかえれば、ここで行ってきた演算子の導入は何か新 たな量子化を行っているわけではないことがわかる。考えたことは粒子数が変動することができるように これまで考えてきた粒子数一定の Hilbert 空間を Fock 空間に拡張して粒子数が変化するような演算子を導 入しただけである。したがって第二量子化という名は非常に誤解を招く言い方である。相互作用のない多 粒子系では、場の演算子は上のように Schrödinger 方程式を満たすが、相互作用のある系ではもちろん方 程式は異なる。非線形の方程式となる。このことだけから見ても第二量子化という名は適切ではないこと がわかるだろう。波動関数と場の演算子は似てはいるが全く異なるものである。

これまでの量子力学では座標は演算子として扱われていたが、場の演算子では空間座標は演算子ではな く c 数として扱われる。座標を演算子として扱っていた場合、それは対応する粒子の座標という意味があ る。ところが、場の演算子で用いる座標はそこに粒子があるかどうかは全く別で、単純に空間の任意の点 を指定するパラメータにすぎない。このように、「第二量子化」によって座標は量子化されるどころか c 数 パラメータに降格される。このことは次節の議論を行ううえで大変都合がよい。

8.2 場の量子化*

前節で Heisenberg の運動方程式を導いたが、これは形式的に次のように書くこともできる。

$$i\hbar \frac{\partial \hat{\psi}(\mathbf{r},t)}{\partial t} = \frac{\delta}{\delta \hat{\psi}^{\dagger}(\mathbf{r},t)} \hat{H}$$
(8.58)

右辺は汎関数微分を表す。例えば、

$$\frac{\delta}{\delta\hat{\psi}^{\dagger}(\boldsymbol{r})} \int \mathrm{d}^{3}\boldsymbol{r}'\,\hat{\psi}^{\dagger}(\boldsymbol{r}')U_{1}(\boldsymbol{r}')\hat{\psi}(\boldsymbol{r}') = U_{1}(\boldsymbol{r})\hat{\psi}(\boldsymbol{r})$$
(8.59)

$$\frac{\delta}{\delta\hat{\psi}(\boldsymbol{r})} \int \mathrm{d}^{3}\boldsymbol{r}'\,\hat{\psi}^{\dagger}(\boldsymbol{r}')U_{1}(\boldsymbol{r}')\hat{\psi}(\boldsymbol{r}') = \pm\hat{\psi}^{\dagger}(\boldsymbol{r})U_{1}(\boldsymbol{r})$$
(8.60)

である。 $\hat{\psi} \ge \hat{\psi}^{\dagger}$ を独立変数とみなしていることに注意してほしい。また、二つめの式で注意してほしいのは Fermi 場の場合には (8.23) 式のような演算子の反可換性を考慮していることである。 $\hat{\psi}$ で微分するために $\hat{\psi}^{\dagger}$ を通り抜けるときにマイナスの符号を生じさせる規則を用いる。同様にして

$$i\hbar \frac{\partial \hat{\psi}^{\dagger}(\boldsymbol{r},t)}{\partial t} = -\frac{\delta}{\delta \hat{\psi}(\boldsymbol{r},t)} \hat{H}$$
(8.61)

も導くことができる。

さて、得られた運動方程式 (8.58)、(8.61) を見てみると古典的な運動方程式とよく対応していることが わかる。簡単のため1粒子の系を考えると、ハミルトニアン H の系で座標と運動量は次の式を満たす。

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t} = \frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{p}} \tag{8.62}$$

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{p}}{\mathrm{d}t} = -\frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{r}} \tag{8.63}$$

これは共役変数 *r* と *p* の満たす Hamilton 方程式である。両者の運動方程式を比較すると形式的に次の対応がある。

$$(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{p}) \leftrightarrow (\hat{\psi}(\boldsymbol{r}), i\hbar\hat{\psi}^{\dagger}(\boldsymbol{r}))$$
 (8.64)

ここで古典力学の定式化と量子力学への移行について簡単な復習をしてみよう。1 粒子の古典系におい て系のラグランジアンは運動エネルギーとポテンシャルエネルギーの差として定義され、座標 r とその時 間微分 r を変数としてもつ¹⁰。ハミルトニアンは次のように定義される。

$$H(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p}) = \boldsymbol{p} \cdot \dot{\boldsymbol{r}} - L(\boldsymbol{r},\dot{\boldsymbol{r}})$$
(8.65)

ラグランジアンとハミルトニアンの間の変換は Legendre 変換である。座標共役運動量 p は

$$\boldsymbol{p} = \frac{\partial L}{\partial \dot{\boldsymbol{r}}} \tag{8.66}$$

によって定義される。このようにして

$$L = \frac{m}{2}\dot{\boldsymbol{r}}^2 - U(\boldsymbol{r}) \tag{8.67}$$

は

$$H = \frac{1}{2m}\boldsymbol{p}^2 + U(\boldsymbol{r}) \tag{8.68}$$

に変換される。量子力学に移行するには座標と運動量を演算子化すればよい。

$$(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{p}) \to (\hat{\boldsymbol{r}}, \hat{\boldsymbol{p}})$$
 (8.69)

これらの演算子には交換関係

$$[\hat{r}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\delta_{ij} \tag{8.70}$$

が課される。

同じことを多体場の系において考えてみよう。ラグランジアンを次のように定義する。

$$L = \int d^{3}\boldsymbol{r} \left[i\hbar\psi^{\dagger}(\boldsymbol{r},t)\dot{\psi}(\boldsymbol{r},t) - \psi^{\dagger}(\boldsymbol{r},t)\left(-\frac{\hbar^{2}}{2m}\boldsymbol{\nabla}^{2} + U_{1}(\boldsymbol{r})\right)\psi(\boldsymbol{r},t)\right] -\frac{1}{2}\int d^{3}\boldsymbol{r}d^{3}\boldsymbol{r}'\,\psi^{\dagger}(\boldsymbol{r},t)\psi^{\dagger}(\boldsymbol{r}',t)V(|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|)\psi(\boldsymbol{r}',t)\psi(\boldsymbol{r},t)$$
(8.71)

座標 r(t)の代わりに場の量 $\psi(r,t)$ を基本変数として用いる。この時点では $\psi(r,t)$ は演算子ではない¹¹。 ラグランジアンが定義されれば共役変数 $\pi(r,t)$ を次のようにして定義することができる。

$$\pi(\mathbf{r},t) = \frac{\delta}{\delta \dot{\psi}(\mathbf{r},t)} L = i\hbar \psi^{\dagger}(\mathbf{r},t)$$
(8.72)

量子化を行うには $\psi(\mathbf{r},t)$ を演算子化して次の交換関係を課せばよい。

$$[\hat{\psi}(\boldsymbol{r},t),\hat{\pi}(\boldsymbol{r}',t)]_{\mp} = i\hbar\delta^3(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')$$
(8.73)

Bose 粒子の場合交換関係、Fermi 粒子の場合反交換関係とする。 $\pi(\mathbf{r},t)$ の定義からこれは (8.23) 式の交換 関係と等価である。このようにして場の理論の量子化がなされる。

いささか形式的であるが、場の量子論ではこのような手法が役に立つ。理論を新たに構成するとき、ま ず場の演算子で書かれたラグランジアンを書き下し、用いられる場の演算子について適当な交換関係を課 せばよいのである。

¹⁰時間 t に陽に依存することもあるがここでは考えない。

¹¹Fermi 粒子の場合、注意が必要となる。古典系といえども反交換する変数を導入しなければならない。問題 [8-4] 参照。

場の量 $\psi(\mathbf{r},t)$ を用いる定式化には、これまでに議論してきたもの以外に主に二つの利点がある。一つめ は座標 \mathbf{r} と時間 t を同列に扱っていることである。相対性理論では両者は同等なもので座標系の取り方に よってまざりあう。したがって、相対論的共変性を保った理論を構成するときには場の量を用いた定式化 が必須のものとなる¹²。

二つめは電磁気学との統一的記述が可能になることである。電磁気学では電磁場 $E(\mathbf{r},t)$ 、 $B(\mathbf{r},t)$ はゲージ(スカラー・ベクトル)ポテンシャル $\phi(\mathbf{r},t)$ 、 $A(\mathbf{r},t)$ を用いて表現される。それらは時空の各点に定義された場の量となる。電磁場と荷電粒子の系においてラグランジアンは次のように書くことができる¹³。

$$L = \int d^{3}\boldsymbol{r} \left[i\hbar\psi^{\dagger}(\boldsymbol{r},t)\dot{\psi}(\boldsymbol{r},t) - \psi^{\dagger}(\boldsymbol{r},t) \left(\frac{1}{2m} \left(-i\hbar\boldsymbol{\nabla} - q\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},t) \right)^{2} + U_{1}(\boldsymbol{r}) + q\phi(\boldsymbol{r},t) \right)\psi(\boldsymbol{r},t) \right] - \frac{1}{2} \int d^{3}\boldsymbol{r} d^{3}\boldsymbol{r}' \,\psi^{\dagger}(\boldsymbol{r},t)\psi^{\dagger}(\boldsymbol{r}',t)V(|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|)\psi(\boldsymbol{r}',t)\psi(\boldsymbol{r},t) - \frac{1}{2} \int d^{3}\boldsymbol{r} \left(\epsilon_{0}\boldsymbol{E}^{2}(\boldsymbol{r},t) - \frac{1}{\mu_{0}}\boldsymbol{B}^{2}(\boldsymbol{r},t) \right)$$
(8.74)

電磁場とゲージポテンシャルは次の関係によってむすばれる。

$$\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r},t) = -\boldsymbol{\nabla}\phi(\boldsymbol{r},t) - \frac{\partial\phi(\boldsymbol{r},t)}{\partial t}$$
(8.75)

$$\boldsymbol{B}(\boldsymbol{r},t) = \boldsymbol{\nabla} \times \boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},t) \tag{8.76}$$

第1章で述べたが、重要な点は電磁場も荷電粒子も各時空点で定義された場の変数を用いて表されていることである。ラグランジアンをこのように書いておいて荷電粒子の場および電磁場について適当な交換関係を課せば量子力学の系を得ることができる。電磁場はその名の通り、場の量を用いて書くのが自然であるからこのように量子力学を書きなおすことによって電磁場と荷電粒子の系の量子化への道がひらける。量子力学が以前の表式にとどまっていたのであれば粒子と電磁場の運動を統一的に扱うことは不可能である¹⁴。

場の量子化は技術的にはたいへんめんどうである。数学的にもいろいろ問題がある¹⁵。交換関係を課すより、経路積分を用いた量子化を行う方が簡単であり応用上も便利である。詳しくは本講義の範囲外である。適当な場の量子論の教科書を参照してほしい。

¹³正しくは相対論的形式にする必要がある。その場合電子は Dirac 場として表される。場の量子論の教科書を参照。

¹²ただし、交換関係による場の量子化は同時刻の演算子を用いてなされる。

¹⁴もちろん、以前の表式で電磁場中の粒子の運動を量子力学的に扱うことはできるが、電磁場はあくまでも外場として扱われ、力 学的自由度として扱うことはできない。

¹⁵拘束条件のある場の演算子の量子化を考える必要がある。これは Dirac 括弧とよばれるものを用いてなされる。

 $[\mathbf{A}]$

[8-1] 場の演算子の性質

(a). 次の交換関係を計算し、場の演算子 $\hat{\psi}(r)$ 、 $\hat{\psi}^{\dagger}(r)$ が粒子数を増減させる演算子であることを確かめよ。

$$[\hat{\psi}(\bm{r}), \hat{N}]$$
 (8–1.1)

$$[\hat{\psi}^{\dagger}(\boldsymbol{r}), \hat{N}] \tag{8-1.2}$$

*Ñ*は(8.32)式の粒子数演算子である。

(b). ハミルトニアン演算子 (8.39) 式と相互作用演算子 (8.41) 式が粒子数演算子 \hat{N} と交換することをそれぞれ示せ。

(c). 式 (8.8) の直交性と次の完全性関係が矛盾していないことを確認せよ。

$$|0\rangle\langle 0| + \sum_{N=1}^{\infty} \frac{1}{N!} \int d^3 \boldsymbol{r}_1 \cdots d^3 \boldsymbol{r}_N | \boldsymbol{r}_1, \dots, \boldsymbol{r}_N \rangle \langle \boldsymbol{r}_1, \dots, \boldsymbol{r}_N | = 1$$
(8-1.3)

(d). 粒子がスピン自由度をもつとき、場の演算子は $\hat{\psi}_{\sigma}(\mathbf{r})$ のように書くことができる。 σ はスピンの自由度を表す。このとき、同種粒子系におけるスピン演算子の和

$$\hat{S} = \sum_{i=1}^{N} \hat{S}_i$$
 (8–1.4)

を、場の演算子を用いて表せ。

[8-2] 異種 Fermi 粒子

2種類の Fermi 粒子を考える。それぞれの生成消滅演算子は次の関係をみたす。

$$[\hat{a}_m^{(1)}, \hat{a}_n^{(1)}]_+ = 0, \qquad [\hat{a}_m^{(1)}, (\hat{a}_n^{(1)})^\dagger]_+ = \delta_{m,n}$$
(8-1.1)

$$[\hat{a}_m^{(2)}, \hat{a}_n^{(2)}]_+ = 0, \qquad [\hat{a}_m^{(2)}, (\hat{a}_n^{(2)})^{\dagger}]_+ = \delta_{m,n} \tag{8-1.2}$$

上付きの添字が粒子の種類を表す。粒子1と粒子2の演算子は交換するとする。 このとき、次の演算子を定義する。

$$\hat{\tilde{a}}_m^{(2)} = (-1)^{\hat{N}^{(1)}} \hat{a}_m^{(2)} \tag{8-1.3}$$

 $\hat{N}^{(1)} = \sum_n (\hat{a}_n^{(1)})^{\dagger} \hat{a}_n^{(1)}$ は粒子1の数演算子を表す。新しく定義した生成消滅演算子 $(\hat{\tilde{a}}_m^{(2)})^{\dagger}$ 、 $\hat{\tilde{a}}_m^{(2)}$ はFermi 粒子の反交換関係を満たし、さらに粒子1の生成消滅演算子と反交換することを示せ。

この結果は、異種 Fermi 粒子の演算子はお互いに交換するとしても反交換するとしてもどちらでもよい ことを意味する¹⁶。

¹⁶ただし、議論をすすめると反交換するのが自然な定義であることがわかる。

[8-3] Fermi 統計の演算子

Fermi 粒子の反交換関係を満たす演算子を考える。

$$\{\hat{a}, \hat{a}^{\dagger}\} = 1, \qquad \{\hat{a}, \hat{a}\} = 0, \qquad \{\hat{a}^{\dagger}, \hat{a}^{\dagger}\} = 0$$

$$(8-3.1)$$

 $\{\hat{A}, \hat{B}\} := \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}$ である。

(a). 調和振動子のときに考えたように、Bose 粒子の演算子の場合には数演算子 $\hat{a}^{\dagger}\hat{a}$ の固有状態を定義することができる。同様の考察を Fermi 演算子の場合に行い、全ての固有状態を求めよ。

(b).「座標」・「運動量」演算子を次のように定義する。

$$\hat{Q} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{a} + \hat{a}^{\dagger}), \qquad \hat{P} = \frac{-i}{\sqrt{2}}(\hat{a} - \hat{a}^{\dagger})$$
(8-3.2)

 \hat{Q} 、 \hat{P} の満たす性質を求めよ。

(c). 演算子 \hat{Q} 、 \hat{P} 、あるいは \hat{a} 、 \hat{a}^{\dagger} を用いて、ハミルトニアンの最も一般的な形を書き下し、エネルギー 固有値を求めよ。

[8-4] コヒーレント状態

(a). Bose 統計を満たす場の演算子 $\hat{\psi}^{\dagger}(r)$ 、 $\hat{\psi}(r)$ に対して、次の固有値方程式を考える。

$$\hat{\psi}(\boldsymbol{r})|\phi\rangle = \phi(\boldsymbol{r})|\phi\rangle$$
(8-4.1)

 $\phi(r)$ は任意の複素関数を表す。このコヒーレント状態が次のように書けることを示せ。

$$|\phi\rangle = \exp\left(\int d^3 \boldsymbol{r} \,\phi(\boldsymbol{r})\hat{\psi}^{\dagger}(\boldsymbol{r})\right)|0\rangle$$
(8-4.2)

(b). 場の演算子を (8.46) 式のように展開する。このとき、 $|\phi\rangle$ は生成消滅演算子 \hat{a}_n についてのコヒーレント状態を用いてどのように書けるか。

(c). コヒーレント状態 (8-4.2) 式について、直交性や完全性を調べよ。

(d). 上で得た結果を Fermi 演算子の場合に拡張する。このとき、 ϕ が Grassmann 数 (Grassmann number) でないと矛盾が生じることを示せ。Grassmann 数は次の反交換関係を満たす。

$$\{\phi(\mathbf{r}), \phi(\mathbf{r}')\} = 0 \tag{8-4.3}$$

[8-5] パラ統計

Bose/Fermi 統計に従う生成消滅演算子を考える。

$$[\hat{a}, \hat{a}^{\dagger}]_{\mp} = 1, \qquad [\hat{a}, \hat{a}]_{\mp} = 0, \qquad [\hat{a}^{\dagger}, \hat{a}^{\dagger}]_{\mp} = 0$$

$$(8-5.1)$$

(a). Bose/Fermi 統計の生成消滅演算子がそれぞれ次の関係を満たすことを示せ。

$$\hat{a} = [\hat{a}, \frac{1}{2} [\hat{a}^{\dagger}, \hat{a}]_{\pm}]_{-}$$
(8-5.2)

(b). 次のパラ Bose/パラ Fermi 統計に従う(生成消滅)演算子を考える。

$$\hat{a} = \sum_{\alpha=1}^{p} \hat{a}^{(\alpha)}$$
 (8-5.3)

pは自然数を表す。生成消滅演算子 $\hat{a}^{(\alpha)\dagger}$ 、 $\hat{a}^{(\alpha)}$ は、上付き添字が同じときは (8–5.1) 式の交換/反交換関係 を満たし、添字が異なるときは反交換/交換する。このとき、生成消滅演算子 \hat{a}^{\dagger} 、 \hat{a} が (8–5.2) 式の交換関 係を満たすことを示せ。

(c). パラ統計に従う系について、真空状態を

$$\hat{a}^{(\alpha)}|0\rangle = 0 \tag{8-5.4}$$

と定義する。このとき、次の式を示せ。

$$\hat{a}\hat{a}^{\dagger}|0\rangle = p|0\rangle \tag{8-5.5}$$

(d). パラ統計において、粒子数演算子が â[†]、â を用いてどのように表されるか考察せよ。

第9章 多体系の量子力学:電子系

本章では多体系の典型的な例である電子系を扱う。原子の構造を簡単に述べた後、多体電子の系において 相互作用を摂動として扱ったときどのような寄与が生じるかを調べる。摂動展開を用いると、量子統計性 による波動関数の(反)対称化によってもたらされる効果を具体的かつ系統的に調べることができる。摂 動展開の各項において仮想的な遷移過程を Feynman ダイアグラムによって表すことは大変有用な方法と なる。

9.1 原子の構造

厳密に解ける量子力学系として Coulomb ポテンシャルの例を「量子力学第二」で扱った。この系では二 つの荷電粒子がそれらの距離に反比例する引力相互作用をしている。2粒子は無限の束縛状態をもち、そ れらによって原子の構造を理解することができる。水素は原子核と電子2体の系であり、解析的に解いた 答えをそのまま適用することができる。原子番号が増えると原子核の電荷と電子の数が増えていき、2体 以上の多体問題として扱われる。それでも基本的な構造は2体問題の解からおおよそのところを理解する ことができる。

Coulomb 相互作用する 2 粒子の束縛状態は量子数 (n, ℓ, m) で特徴づけられる。自然数の主量子数 n に対して、角運動量の方位量子数 ℓ は 0 から n-1、磁気量子数 m は $-\ell$ から ℓ の整数をとる。エネルギーの値は主量子数で決まる。 $\ell = 0$ の軌道を s 軌道、 $\ell = 1$ を p 軌道、 $\ell = 2$ を d 軌道、 $\ell = 3$ を f 軌道、とよぶ¹。電子はこれらの軌道 (状態)をとる。

電子が複数存在する原子の場合、電子は Fermi 粒子であるからエネルギーの小さい順に状態を占める。 また、電子はスピン 1/2 をもつので、それぞれの軌道を二つの粒子が占めることができる。このように考 えると原子の電子配置は図 9.1 のようになる。

原子番号	原子名	1s	2s	2p	3s
1	Н	1			
2	He	2			
3	Li	2	1		
4	Be	2	2		
5	В	2	2	1	
6	С	2	2	2	
7	Ν	2	2	3	
8	0	2	2	4	
9	F	2	2	5	
10	Ne	2	2	6	
11	Na	2	2	6	1
•					

表 9.1: 原子と電子軌道

¹それぞれ sharp、principal、diffuse、fundamental (あるいは fine) の頭文字をとっているそうである。f の後は g、h、i と続く。



図 9.1: 各原子のイオン化エネルギー。

原子は主量子数の軌道全てを電子が占めるときに安定になる。安定というのはイオン化エネルギー、つまり一つの電子を原子から引き離すのに必要なエネルギーが大きいということである。原子番号が2、10、18、のときがその閉殻を形成する場合にあたり、図9.1に示すように、イオン化エネルギーは大きい。それらの原子番号に1を足した原子では逆に最外殻の電子が原子の束縛から離れて動き回りやすくなる。

この軌道の概念は電子間相互作用の効果を無視したものであるが、それでも原子のおおよその構造を捉 えることができるのはとても興味深い。次節以降では自由電子の模型と相互作用の効果を考えていく。

以下では考えないが、電子にはスピン-軌道相互作用により生じる微細構造や、磁気双極子モーメントによる超微細構造、Lambシフトなど高次の補正が存在する。スピン軌道相互作用は相対論的量子力学によって導かれるものであり、Lambシフトは量子電磁力学を用いた高次補正の計算が必要となる。これらの一部は第I部において摂動項の例としてとりあげ、縮退している準位が分裂することなどを見た。

9.2 多体電子系

本節では多体電子の系を扱う。固体中では原子核は空間の各点に固定され、最外殻付近の電子が原子核 による周期ポテンシャルおよび電子間相互作用を行いながら動きまわるか局在する。固体物理学の中心的 課題であるが、現実の問題に基づいた詳しい議論は別講義があるはずなのでそちらに譲る。ここでは最も 簡単な自由電子の系を扱い相互作用の効果を摂動的に調べる。相互作用の効果は次章でも異なる状況の場 合を調べる。

9.2.1 自由 Fermi 系

相互作用する問題を解くことは非常に難しい。とりあえずここでは自由電子の多体系を考えてみよう。電子はスピン 1/2 をもつ Fermi 粒子である。相互作用がなければ波動関数は

$$\phi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}$$
(9.1)

と書くことができる。無限の大きさの体積を考えると規格化できないので有限の体積 $V = L^3$ の箱を考えて最後に無限大にするという手順を用いる。これは「熱・統計力学第一」で行った手法である。周期境界条件を用いると、波数は

$$\boldsymbol{k} = \frac{2\pi}{L}\boldsymbol{n} \tag{9.2}$$

をとる。n は整数を成分としてもつ3次元ベクトルである。離散値から連続値へのおきかえは次のように すればよい。

$$\sum_{\boldsymbol{n}} \to \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \int \mathrm{d}^3 \boldsymbol{k} \tag{9.3}$$

以下では和のままで計算を行って最後の計算でこのおきかえをする。

場の演算子は固有関数を用いて Fourier 変換を行うことができる。

$$\hat{\psi}_{\sigma}(\boldsymbol{r}) = \sum_{\boldsymbol{k}} \hat{a}_{\boldsymbol{k},\sigma} \phi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\boldsymbol{k}} \hat{a}_{\boldsymbol{k},\sigma} \mathrm{e}^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}$$
(9.4)

 σ はスピン自由度を表し2通りの値をとる。演算子 $\hat{a}_{k,\sigma}$ は (k,σ) で特徴づけられる1 粒子状態を消滅させる演算子を表す。ハミルトニアンは

$$\hat{H}_{0} = \sum_{\sigma} \int d^{3}\boldsymbol{r} \, \hat{\psi}_{\sigma}^{\dagger}(\boldsymbol{r}) \left(-\frac{\hbar^{2}}{2m}\boldsymbol{\nabla}^{2}\right) \hat{\psi}_{\sigma}(\boldsymbol{r}) = \sum_{\boldsymbol{k},\sigma} \frac{\hbar^{2}\boldsymbol{k}^{2}}{2m} \hat{a}_{\boldsymbol{k},\sigma}^{\dagger} \hat{a}_{\boldsymbol{k},\sigma}$$
(9.5)

と書ける。

「熱・統計力学第二」で既に考えたが、基底状態のエネルギーを計算してみよう。エネルギーを小さくす るために各粒子は |k| がなるべく小さい状態をとる。Fermi 粒子は同じ状態を占めることができないから、 1 粒子エネルギーを下から小さい順に粒子をつめたものが基底状態を表す。

$$|\psi_{0}\rangle = \prod_{\substack{\boldsymbol{k} \\ (|\boldsymbol{k}| \le k_{\mathrm{F}})}} \prod_{\sigma} \hat{a}_{\boldsymbol{k},\sigma}^{\dagger} |0\rangle$$
(9.6)

どこまでつめるかを表す上限の波数(の大きさ) $k_{\rm F}$ を Fermi 波数(Fermi wavenumber)とよぶ²。3次元の波数空間で半径 $k_{\rm F}$ の内部に粒子がつまっており、 $k = k_{\rm F}$ の表面を Fermi 面(Fermi surface)とよぶ。これは電子密度によって決められるものである。電子数はつまっている1粒子状態の数と等しいから

$$N = \sum_{\substack{\boldsymbol{k} \\ (|\boldsymbol{k}| \le k_{\mathrm{F}})}} 2 \tag{9.7}$$

と書ける。2はスピン自由度を表している。和を積分に直して計算すると

$$N = 2V \int \frac{\mathrm{d}^3 \mathbf{k}}{(2\pi)^3} \,\theta(k_{\rm F} - k) = \frac{V}{\pi^2} \int_0^{k_{\rm F}} k^2 \mathrm{d}k = \frac{V k_{\rm F}^3}{3\pi^2} \tag{9.8}$$

つまり

$$k_{\rm F} = \left(3\pi^2 \frac{N}{V}\right)^{1/3} \tag{9.9}$$

となる。Fermi 波数は密度 N/V によって決まる関数である。また、この基底状態のエネルギーは

$$E_0 = \sum_{\substack{\mathbf{k} \\ (|\mathbf{k}| < k_{\rm F})}} \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{m} = \frac{V}{\pi^2} \int_0^{k_{\rm F}} k^2 \mathrm{d}k \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{V \hbar^2 k_{\rm F}^5}{10\pi^2 m}$$
(9.10)

と計算される。1粒子あたりのエネルギーとして表すと

$$\frac{E}{N} = \frac{3}{5}\epsilon_{\rm F} = \frac{3}{5}\frac{\hbar^2 k_{\rm F}^2}{2m}$$
(9.11)

である。 ϵ_F を Fermi エネルギー (Fermi energy) という。Fermi 波数をもつ 1 粒子状態の 1 粒子エネル ギーを表す。全体のエネルギー密度はその 3/5 倍となる。Fermi 波数、Fermi エネルギー、1 粒子あたりの エネルギーは粒子の密度で決まる。

²あるいは $p_{\rm F} = \hbar k_{\rm F}$ を Fermi 運動量 (Fermi momentum) とよぶ。

9.2.2 基底の変換と反粒子・準粒子

生成消滅演算子を用いる利点のひとつは、さまざまな基底の変換を考えることができることにある。例 えば反粒子の演算子である。自由 Fermi 粒子の基底状態に対して次の演算子を導入する。

$$\hat{a}_{\boldsymbol{k},\sigma} = \begin{cases} \hat{a}_{\boldsymbol{k},\sigma} & |\boldsymbol{k}| > k_{\mathrm{F}} \\ \hat{a}_{\boldsymbol{k},\sigma}^{\dagger} & |\boldsymbol{k}| \le k_{\mathrm{F}} \end{cases}$$
(9.12)

 $|\mathbf{k}| > k_{\rm F}$ の演算子は何も変えていない。 $|\mathbf{k}| \le k_{\rm F}$ の演算子について生成演算子と消滅演算子をいれかえる。 このように演算子の役割をいれかえても演算子としての性質は変わらない。

$$[\hat{\bar{a}}_{\boldsymbol{k},\sigma},\hat{\bar{a}}_{\boldsymbol{k}',\sigma'}^{\dagger}]_{+} = \delta_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}'}\delta_{\sigma,\sigma'}$$

$$(9.13)$$

つまり、元の粒子の消滅演算子だったものは反粒子の生成演算子となる。粒子を消すことは反粒子を作ると解釈できる。

この演算子を用いると、ハミルトニアン

$$\hat{H} = \sum_{\boldsymbol{k},\sigma} \frac{\hbar^2 \boldsymbol{k}^2}{2m} \hat{a}^{\dagger}_{\boldsymbol{k},\sigma} \hat{a}_{\boldsymbol{k},\sigma}$$
(9.14)

は

$$\hat{H} = \sum_{\substack{\mathbf{k} \\ (|\mathbf{k}| > k_{\mathrm{F}})}} \sum_{\sigma} \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m} \hat{a}^{\dagger}_{\mathbf{k},\sigma} \hat{a}_{\mathbf{k},\sigma} + \sum_{\substack{\mathbf{k} \\ (|\mathbf{k}| \le k_{\mathrm{F}})}} \sum_{\sigma} \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m} \hat{a}_{\mathbf{k},\sigma} \hat{a}^{\dagger}_{\mathbf{k},\sigma}$$
(9.15a)

$$= \sum_{\boldsymbol{k},\sigma} \frac{\hbar^2 \boldsymbol{k}^2}{2m} \hat{a}^{\dagger}_{\boldsymbol{k},\sigma} \hat{a}_{\boldsymbol{k},\sigma} - \sum_{\boldsymbol{k},\sigma} \frac{\hbar^2 \boldsymbol{k}^2}{2m} \hat{a}^{\dagger}_{\boldsymbol{k},\sigma} \hat{a}_{\boldsymbol{k},\sigma} + E_0$$
(9.15b)

と書くことができる。*E*₀ は基底状態のエネルギーである。第1項と第2項は基底状態に作用させると0に なる。このように演算子を書いておくと基底状態からの励起を考えやすくなる。第2項は負なので反粒子 があるほどエネルギーが小さくなる。反粒子が存在するということは粒子がないということである。粒子 がないとその分エネルギーが減るので反粒子のエネルギーが負になるのは自然な結果である。粒子数一定 であれば、粒子と反粒子を対でつくる必要がある。その場合、Fermi エネルギー付近の粒子を対生成する のが低励起状態を表す。

さらに、生成演算子と消滅演算子をまぜた変換を考えることができて、それは準粒子(quasiparticle)を 表す演算子となる。問題 [9-4] に準粒子変換の例を示す。準粒子は例えば超伝導の例において見ることがで きる。

いずれの場合も変換によって新しい演算子を定義すれば、それに対応する真空が存在する。つまり、「真空」は無数に存在するものである。以前にも述べたように、真空が定義できればそこからの励起を全て記述することができるので、真空を理解することは多体系の状態を理解することにつながる。

9.2.3 相互作用

ある種の原子では最外殻の電子がほぼ自由電子のように動き回ることができる。このような原子がたく さん集まった系では正電荷が分布する中をたくさんの電子が動き回っている。電子は正の電荷をもつ原子 核および他の電子と相互作用する。相互作用が小さければ電子はほぼ自由に動き回ることができて、系は 金属の性質を示す。このような系の性質を議論してみよう。

原子核は各点に固定されているので力学的自由度とはみなさず、それらがつくる相互作用を外部ポテンシャルのように扱う。ここでは簡単のために正の電荷が一様に分布していると考えよう。正の電荷の中で電子が運動しており、全電荷は0である。このような模型はジェリウム模型(Jellium model)とよばれる³。

³正電荷が一様に分布する様子をゼリー (jelly)にたとえている。

ハミルトニアンは三つの項からなる。

$$H = H^{\rm e} + H^{\rm ep} + H^{\rm p} \tag{9.16}$$

電子の項 \hat{H}^{e} 、正電荷の項 \hat{H}^{p} 、それらの間の相互作用項 \hat{H}^{ep} である。全ての粒子間には粒子間の距離に反比例する Coulomb 相互作用がはたらく。それぞれの項は生成消滅演算子を用いない表現で次のように書ける。

$$H_N^{\rm e} = \sum_{i=1}^N \frac{\boldsymbol{p}_i^2}{2m} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j\\(i\neq j)}}^N \frac{1}{|\boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{r}_j|}$$
(9.17)

$$H^{\mathrm{p}} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{2} \int \mathrm{d}^3 \boldsymbol{r} \mathrm{d}^3 \boldsymbol{r}' \, n(\boldsymbol{r}) n(\boldsymbol{r}') \frac{1}{|\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}'|}$$
(9.18)

$$H_N^{\rm ep} = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i=1}^N \int \mathrm{d}^3 \boldsymbol{r} \, n(\boldsymbol{r}) \frac{1}{|\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_i|} \tag{9.19}$$

電子の数を N とした。正電荷は静止していて力学変数とは考えない。n(r) は正電荷の密度である。ジェリウム模型では一様な値 N/V にとる。

相互作用によるエネルギーは単純に考えると発散してしまう。正電荷が一様に分布しているときのエネ ルギーは無限大となってしまう。ところがそれは正電荷のみを考えていたことによる発散であって、電子 を考慮に入れると全体として中性となる系は有限のエネルギーをもつと期待される。これが正の電荷分布 を考える理由でもある。このことに注意しながら計算を行う。

まず、正電荷の寄与から考えよう。正電荷の Coulomb エネルギーは次のように書ける。

$$H^{\rm p} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{2} \left(\frac{N}{V}\right)^2 \int {\rm d}^3 \mathbf{r} {\rm d}^3 \mathbf{r}' \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{2} \frac{N^2}{V} \int {\rm d}^3 \mathbf{r} \frac{1}{|\mathbf{r}|}$$
(9.20)

確かにこの積分は $r \to \infty$ で発散する。そこで、次のように Coulomb 相互作用の距離に依存する部分をお きかえる。

$$\frac{1}{|\mathbf{r}|} \to \frac{\mathrm{e}^{-\mu|\mathbf{r}|}}{|\mathbf{r}|} \tag{9.21}$$

 μ は正の定数を表す。このようにすれば相互作用は長距離で急速に減衰する関数となり積分は収束する。そこで μ をいれて計算を行って最後に $\mu \to 0$ の極限をとる。もし、まともな系であれば最後の表式で μ を 0 にとっても発散しないはずである。やや恣意的な方法に見えるが、これは遮蔽効果によるものと考えることもできる。正負の電荷が分布している系では遠くの電荷は遮蔽効果によって打ち消される。このようにおきかえを行うと正電荷のエネルギーは

$$H^{\rm p} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{2} \frac{N^2}{V} \int d^3 \boldsymbol{r} \, \frac{\mathrm{e}^{-\mu|\boldsymbol{r}}}{|\boldsymbol{r}|} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{2} \frac{N^2}{V} 4\pi \int r^2 \mathrm{d}r \, \frac{\mathrm{e}^{-\mu r}}{r} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{2} \frac{N^2}{V} \frac{4\pi}{\mu^2} \tag{9.22}$$

と計算される。 $\mu \rightarrow 0$ とすると発散する。この項が他の項と相殺することは以下の計算で確かめられる。

次に、電子と正電荷の相互作用項である。正電荷の分布が一様であるとき、この項は定数になり電子の 座標によらない。つまり、

$$H^{\rm ep} = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{N}{V} \sum_{i=1}^N \int d^3 \boldsymbol{r} \, \frac{1}{|\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_i|} = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{N^2}{V} \int d^3 \boldsymbol{r} \, \frac{1}{|\boldsymbol{r}|}$$
(9.23)

である。μを導入して積分を行うと

$$H^{\rm ep} = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{N^2}{V} \frac{4\pi}{\mu^2}$$
(9.24)

となる。二つの寄与をあわせると

$$H^{\rm p} + H^{\rm ep} = -\frac{1}{2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{N^2}{V} \frac{4\pi}{\mu^2}$$
(9.25)



図 9.2: 相互作用の表現。左が座標表示で右が波数表示。実線が Fermi 粒子、波線が相互作用を表している。座標表示の場合、●によって表されている頂点(vertex)は相互作用する座標点を表す。波数表示の場合、各線は一定の波数をもつ。各頂点で波数は保存する。

を得る。

残るは電子の自由度である。 \hat{H}_N^e を前章で議論した場の演算子を用いた表現にすることを考える。スピン 1/2 の自由度をもつ場の演算子 $\hat{\psi}_{\sigma}(\mathbf{r})$ を導入してハミルトニアンは

$$\hat{H}^{e} = \sum_{\sigma=1}^{2} \int d^{3}\boldsymbol{r} \, \hat{\psi}_{\sigma}^{\dagger}(\boldsymbol{r}) \left(-\frac{\hbar^{2}}{2m}\boldsymbol{\nabla}^{2}\right) \hat{\psi}_{\sigma}(\boldsymbol{r}) + \frac{1}{2} \frac{e^{2}}{4\pi\epsilon_{0}} \sum_{\sigma,\sigma'} \int d^{3}\boldsymbol{r} d^{3}\boldsymbol{r}' \, \hat{\psi}_{\sigma}^{\dagger}(\boldsymbol{r}) \hat{\psi}_{\sigma'}^{\dagger}(\boldsymbol{r}') \frac{1}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|} \hat{\psi}_{\sigma'}(\boldsymbol{r}') \hat{\psi}_{\sigma}(\boldsymbol{r})$$

$$(9.26)$$

と書かれる。前節の復習であるが、このハミルトニアンの表現は粒子数によらない形で書かれていることに 注意してほしい。また、スピンを導入した場合、スピンの自由度が陽に表されていることも違いである⁴。

相互作用がなければ自由 Fermi 粒子の系であるから (9.4) 式のように Fourier 変換を行うのが便利である。この基底を用いて (9.26) 式第 2 項の相互作用 \hat{V} を表すと

$$\hat{V} = \frac{1}{2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{V} \sum_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{p},\boldsymbol{q}} \sum_{\sigma,\sigma'} \frac{4\pi}{\boldsymbol{q}^2 + \mu^2} \hat{a}^{\dagger}_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q},\sigma} \hat{a}^{\dagger}_{\boldsymbol{p}-\boldsymbol{q},\sigma'} \hat{a}_{\boldsymbol{p},\sigma'} \hat{a}_{\boldsymbol{k},\sigma}$$
(9.27)

である(問題 [9-1])。ここで μ を導入した。相互作用項は二つの消滅演算子と生成演算子からなる。k、pの波数をもつ粒子を消してk+q、p-qの波数をもつ粒子を作る。相互作用によって波数 qの交換がなされていることがわかる。このような 2 体相互作用は図 9.2 のように表現することができる。これを Feynmanダイアグラム (Feynman diagram)という。摂動の各項はこのような Feynman ダイアグラムを組み合わせて表現することができる。

相互作用の効果を摂動を用いて調べてみよう。基底状態エネルギーの1次補正は、摂動項である \hat{V} を (9.6)式の基底状態ではさむことによって計算される。

$$E_0^{(1)} = \langle \psi_0 | \hat{V} | \psi_0 \rangle \tag{9.28}$$

この量を得るためには次の期待値を計算すればよい。

$$\sum_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{p}} \sum_{\sigma,\sigma'} \langle \psi_0 | \hat{a}^{\dagger}_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q},\sigma} \hat{a}^{\dagger}_{\boldsymbol{p}-\boldsymbol{q},\sigma'} \hat{a}_{\boldsymbol{p},\sigma'} \hat{a}_{\boldsymbol{k},\sigma} | \psi_0 \rangle$$
(9.29)

この式を左から見ると、基底状態に対して粒子を二つ消してまた二つ作って基底状態に残っている成分を 取り出す。基底状態に戻るためには次の2通りが考えられる。

> (i) q = 0(ii) p = k + q, $\sigma = \sigma'$

これらは図 9.3 のようにあらわされる。(i) の場合、消した粒子はまた同じ波数でつくられる過程を表して おり、相互作用ポテンシャルの *q* = 0 のモードのみが寄与する。(ii) の場合には相互作用によって粒子の交 換が生じる。過程の前後で波数(運動量)およびエネルギーが保存している。

 $^{^4}$ 生成消滅演算子を用いない表式の場合、スピンの自由度は $\hat{H}_N o \hat{H}_N \otimes \hat{I}_2$ のように 2 成分の単位演算子 \hat{I}_2 をかけて表現される。自明なものとして省略されることも多い。



図 9.3: 式 (9.29) に寄与する仮想的なプロセス。左は消した粒子がまた元に戻る。右は粒子の交換が行われる。

このように摂動の寄与を見てみると、粒子の交換というように実際の物理的な過程が生じるような解釈 ができるが、これはあくまでも量子力学的な仮想的な過程であることに注意してほしい。このような描像 は摂動計算を行うときにとても役に立つのであるが、あくまでもそれは計算過程におけるひとつの解釈に とどめておいた方がよいだろう。

(i) の寄与は相互作用の q = 0 のモードにより生じるが、波数 0 というのは座標空間で見ると定数の相互 作用を意味する。自由電子の模型では Coulomb 相互作用の長距離性により発散してしまうが、正電荷の寄 与を含めて考えると中性条件より相殺して 0 になる。(i) の寄与は次のように計算される。

$$\delta_{\boldsymbol{q},\boldsymbol{0}} \sum_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{p}} \sum_{\sigma,\sigma'} \langle \psi_0 | \hat{a}^{\dagger}_{\boldsymbol{k},\sigma} \hat{a}^{\dagger}_{\boldsymbol{p},\sigma'} \hat{a}_{\boldsymbol{p},\sigma'} \hat{a}_{\boldsymbol{k},\sigma} | \psi_0 \rangle$$

$$= \delta_{\boldsymbol{q},\boldsymbol{0}} \sum_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{p}} \sum_{\sigma,\sigma'} \langle \psi_0 | \left(\hat{a}^{\dagger}_{\boldsymbol{k},\sigma} \hat{a}_{\boldsymbol{k},\sigma} \hat{a}^{\dagger}_{\boldsymbol{p},\sigma'} \hat{a}_{\boldsymbol{p},\sigma'} - \delta_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{p}} \delta_{\sigma,\sigma'} \hat{a}^{\dagger}_{\boldsymbol{k},\sigma} \hat{a}_{\boldsymbol{k},\sigma} \right) | \psi_0 \rangle \qquad (9.30a)$$

$$= \delta_{\boldsymbol{q},\boldsymbol{0}} (N^2 - N) \qquad (9.30b)$$

N は電子の数を表す。これを相互作用の表現に代入すると

$$\frac{1}{2}\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\frac{1}{V}\sum_{\boldsymbol{q}}\frac{4\pi}{\boldsymbol{q}^2+\mu^2}\delta_{\boldsymbol{q},\boldsymbol{0}}(N^2-N) = \frac{1}{2}\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\frac{N^2-N}{V}\frac{4\pi}{\mu^2} \sim \frac{1}{2}\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\frac{N^2}{V}\frac{4\pi}{\mu^2}$$
(9.31)

となる。粒子数が十分大きい近似 $N^2 - N \sim N^2$ を用いた。この項は (9.25) 式と逆符号をもつから確かに 相殺してエネルギーへの寄与は 0 になる。

(ii)の寄与を計算する。(i)と同様にして

$$\sum_{\mathbf{k}} \sum_{\sigma} \langle \psi_0 | \hat{a}^{\dagger}_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma} \hat{a}^{\dagger}_{\mathbf{k},\sigma} \hat{a}_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma} \hat{a}_{\mathbf{k},\sigma} | \psi_0 \rangle$$

= $-(1 - \delta_{\mathbf{q},\mathbf{0}}) \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\sigma} \langle \psi_0 | \hat{a}^{\dagger}_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma} \hat{a}_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma} \hat{a}^{\dagger}_{\mathbf{k},\sigma} \hat{a}_{\mathbf{k},\sigma} | \psi_0 \rangle$ (9.32a)

$$= -2(1 - \delta_{\boldsymbol{q},\boldsymbol{0}}) \sum_{\boldsymbol{k}} \theta(k_{\mathrm{F}} - k)\theta(k_{\mathrm{F}} - |\boldsymbol{k} + \boldsymbol{q}|)$$
(9.32b)

より

$$E_0^{(1)} = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{V} \sum_{q\neq 0} \frac{4\pi}{q^2 + \mu^2} \sum_{k} \theta(k_{\rm F} - k) \theta(k_{\rm F} - |\mathbf{k} + \mathbf{q}|)$$
(9.33)

を得る。和を積分に直して計算を行うと、

$$\sum_{\boldsymbol{k}} \theta(k_{\rm F} - k)\theta(k_{\rm F} - |\boldsymbol{k} + \boldsymbol{q}|) \rightarrow V \int \frac{\mathrm{d}^3 \boldsymbol{k}}{(2\pi)^3} \theta(k_{\rm F} - k)\theta(k_{\rm F} - |\boldsymbol{k} + \boldsymbol{q}|)$$
(9.34a)

$$= \frac{V}{4\pi^2} k_{\rm F}^3 \left[\frac{1}{24} \left(\frac{q}{k_{\rm F}} \right)^3 - \frac{q}{2k_{\rm F}} + \frac{2}{3} \right] \theta \left(2 - \frac{q}{k_{\rm F}} \right)$$
(9.34b)

より

$$\frac{E_0^{(1)}}{N} = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{3k_{\rm F}}{4\pi}$$
(9.35)

を得る(問題 [9-2])⁵。以上より、1 粒子あたり基底状態のエネルギーは

$$\frac{E}{N} \sim \frac{3}{5} \epsilon_{\rm F} \left(1 - \frac{5}{2\pi} \frac{1}{k_{\rm F} a_{\rm B}} \right) \tag{9.36}$$

と見積もることができる。

得られた結果を見ると、相互作用による効果はエネルギーを低下させることがわかる。考えた相互作用 は正の斥力なので負になることは自明ではない。どこから負符号が生じたかをふりかえって調べてみると (9.32) 式であることがわかるだろう。これは(ii)の粒子を交換する過程から得られたものである。このよう な過程が得られたことは同種粒子の効果を採り入れたからである。次章でもくわしく議論するが、(i)の寄 与は古典的にも理解できる過程であるが、(ii)は同種粒子の効果をとりいれたことにより生じたものであ る。得られた補正は量子効果によるものといえる。

また、摂動近似がよい条件を調べる。得られた結果より $k_{\rm F}a_{\rm B} \gg 1$ であることが条件となる。Bohr 半径 $a_{\rm B}$ は相互作用項の係数 $\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}$ に逆比例するから、この係数が小さいことが条件となる。これは当然の結果で ある。条件には Fermi 波数 $k_{\rm F}$ もあらわれる。これが大きくなるのは密度 N/V が大きくなるときである。 つまり、摂動近似は高密度の系でよい近似となる。

高密度の方が相互作用が無視できるというのはおかしなことのように思える。高密度になって電子が近づけば近づくほど Coulomb 相互作用が強く働くからである。このことを少し考察してみよう。相互作用エネルギーが小さいかどうかは運動エネルギーと比較することでわかる。1 粒子の運動エネルギーは不確定 性関係 $\sigma(p)\sigma(x) \sim \hbar$ を用いると

$$E_{\rm K} \sim \frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r_0^2}$$
 (9.37)

と見積もられる。r0 は電子間の平均距離を表す。同様に、相互作用のおおよその大きさは

$$E_{\rm C} \sim \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r_0} \tag{9.38}$$

となる。r₀は電子の平均距離であるから密度によって決まる。つまり、

$$\frac{4\pi}{3}r_0^3 N = V \tag{9.39}$$

の関係から決まる。運動エネルギーと相互作用エネルギーの比をとってみると

$$\frac{E_{\rm C}}{E_{\rm K}} \sim \frac{me^2}{2\pi\epsilon_0 \hbar^2} r_0 \sim \frac{r_0}{a_{\rm B}} \tag{9.40}$$

である。電子の平均距離が Bohr 半径と比較して十分小さいときに、相互作用の寄与は小さい。それは高密 度のときであるから、上で得た結果と矛盾しない。計算を追ってみると、相互作用が距離に反比例してい ることが重要な役割を果たしていることがわかる。1/r² や 1/r³ のような高次べきの場合には高密度ほど 相互作用の寄与が強くなる。べきが大きいほど相互作用は遠くまで及ばなくなる。つまり、高密度で相互 作用が無視できるという性質は Coulomb 相互作用の長距離性を反映した結果であると結論できる。1 次の 摂動計算を用いて長距離相互作用系の非自明な性質を見ることができる。

低密度の系では相互作用は無視できない。電子は自由に運動することができずに結晶のような構造をとることが知られている。これは Wigner 結晶 (Wigner crystal) とよばれている。

⁵この計算は初等的な計算であるがけっこう大変である。

9.3 問題

 $[\mathbf{A}]$

[9-1] 相互作用項

式 (9.26)の第2項について、(9.4)式の変換および (9.21)式のおきかえを用いて (9.27)式を導け。つま り、次の2行目の等式を導く。

$$\hat{V} = \frac{1}{2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \sum_{\sigma,\sigma'} \int d^3 \boldsymbol{r} d^3 \boldsymbol{r}' \, \hat{\psi}^{\dagger}_{\sigma}(\boldsymbol{r}) \hat{\psi}^{\dagger}_{\sigma'}(\boldsymbol{r}') \frac{e^{-\mu|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|} \hat{\psi}_{\sigma'}(\boldsymbol{r}') \hat{\psi}_{\sigma}(\boldsymbol{r})$$
(9-1.1a)

$$= \frac{1}{2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{V} \sum_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{p},\boldsymbol{q}} \sum_{\sigma,\sigma'} \frac{4\pi}{\boldsymbol{q}^2 + \mu^2} \hat{a}^{\dagger}_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q},\sigma} \hat{a}^{\dagger}_{\boldsymbol{p}-\boldsymbol{q},\sigma'} \hat{a}_{\boldsymbol{p},\sigma'} \hat{a}_{\boldsymbol{k},\sigma}$$
(9-1.1b)

[9-2] ジェリウム模型の基底状態エネルギー

ジェリウム模型の基底状態エネルギーについて、相互作用による摂動の1次の寄与

$$E_0^{(1)} = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{V} \sum_{\boldsymbol{q}(\neq \boldsymbol{0})} \frac{4\pi}{\boldsymbol{q}^2 + \mu^2} \sum_{\boldsymbol{k}} \theta(k_{\rm F} - k)\theta(k_{\rm F} - |\boldsymbol{k} + \boldsymbol{q}|)$$
(9-2.1)

を計算する。和を積分に直して計算を行い、

$$\sum_{\boldsymbol{k}} \theta(k_{\rm F} - k)\theta(k_{\rm F} - |\boldsymbol{k} + \boldsymbol{q}|) \rightarrow V \int \frac{\mathrm{d}^3 \boldsymbol{k}}{(2\pi)^3} \theta(k_{\rm F} - k)\theta(k_{\rm F} - |\boldsymbol{k} + \boldsymbol{q}|)$$
(9-2.2a)

$$= \frac{V}{4\pi^2} k_{\rm F}^3 \left[\frac{1}{24} \left(\frac{q}{k_{\rm F}} \right)^3 - \frac{q}{2k_{\rm F}} + \frac{2}{3} \right] \theta \left(2 - \frac{q}{k_{\rm F}} \right) \qquad (9-2.2b)$$

および

$$\frac{E_0^{(1)}}{N} = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{3k_{\rm F}}{4\pi}$$
(9-2.3)

を示せ。

 $[\mathbf{B}]$

[9-3] 平均場近似

次の2体相互作用する Fermi 粒子系のハミルトニアンを考える。

$$\hat{H} = \int d^3 \boldsymbol{r} \, \hat{\psi}^{\dagger}(\boldsymbol{r}) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \boldsymbol{\nabla}^2 + U_1(\boldsymbol{r}) \right) \hat{\psi}(\boldsymbol{r}) + \frac{1}{2} \int d^3 \boldsymbol{r} d^3 \boldsymbol{r}' \, \hat{\psi}^{\dagger}(\boldsymbol{r}) \hat{\psi}^{\dagger}(\boldsymbol{r}') V_2(|\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}'|) \hat{\psi}(\boldsymbol{r}') \hat{\psi}(\boldsymbol{r}) \quad (9-3.1)$$

場の演算子を適当な基底関数で展開する。

$$\hat{\psi}(\boldsymbol{r}) = \sum_{\alpha} \hat{a}_{\alpha} \phi_{\alpha}(\boldsymbol{r}) \tag{9-3.2}$$

基底関数 $\phi_{\alpha}(\mathbf{r})$ は正規直交性を満たす。

$$\int d^3 \boldsymbol{r} \, \phi^*_{\alpha}(\boldsymbol{r}) \phi_{\alpha'}(\boldsymbol{r}) = \delta_{\alpha,\alpha'} \tag{9-3.3}$$

第6.2節(81ページ)と同様の変分計算を行う。系の基底状態を次のように仮定する。

$$|\psi_0\rangle = \prod_{i=1}^N \hat{a}^{\dagger}_{\alpha_i}|0\rangle \tag{9-3.4}$$

この状態から計算されるハミルトニアンの期待値がなるべく小さくなるように基底関数 $\phi_{\alpha}(r)$ を決定する。

(a). 状態に対して次の変分を考える

$$|\psi_0\rangle \to |\psi_0\rangle + f_{\beta\alpha} \hat{a}^{\dagger}_{\beta} \hat{a}_{\alpha} |\psi_0\rangle \tag{9-3.5}$$

 $f_{\beta\alpha}$ は微小パラメータ、 α は α_i のいずれか、 β はそれら以外のラベルを表す。式 (6.31) (81 ページ)と同様にハミルトニアンの期待値の極値条件を考えると

$$\langle \psi_0 | \hat{a}^{\dagger}_{\alpha} \hat{a}_{\beta} \hat{H} | \psi_0 \rangle = 0 \tag{9-3.6}$$

を得る。次の量を用いて条件式を表せ。

$$t_{\gamma\delta} = \int \mathrm{d}^3 \boldsymbol{r} \, \phi_{\gamma}^*(\boldsymbol{r}) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \boldsymbol{\nabla}^2 + U_1(\boldsymbol{r}) \right) \phi_{\delta}(\boldsymbol{r}), \qquad (9-3.7)$$

$$v_{\gamma\delta\eta\rho} = \int \mathrm{d}^{3}\boldsymbol{r} \mathrm{d}^{3}\boldsymbol{r}' \,\phi_{\gamma}^{*}(\boldsymbol{r})\phi_{\delta}^{*}(\boldsymbol{r}')V_{2}(|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|)\phi_{\eta}(\boldsymbol{r}')\phi_{\rho}(\boldsymbol{r})$$
(9-3.8)

(b). 有効1粒子ハミルトニアンの満たす固有値方程式(6.32)(82ページ)に対応する式はどのようになるか調べ、相違点を議論せよ⁶。

[9-4] Bogoliubov 変換

次のハミルトニアンを考える。

$$\hat{H} = \epsilon \left(\hat{a}_{1}^{\dagger} \hat{a}_{1} + \hat{a}_{2}^{\dagger} \hat{a}_{2} \right) + \Delta \left(\hat{a}_{1}^{\dagger} \hat{a}_{2}^{\dagger} + \hat{a}_{2} \hat{a}_{1} \right)$$
(9-4.1)

Bose 粒子が 2 種類または Fermi 粒子が 2 種類あり、粒子の種類を下付きの添字で表す。 ϵ および Δ は定数 を表す。

(a). Bose 粒子を考え、次の演算子を導入する。

$$\hat{b}_1 = \hat{a}_1 \cosh\theta + \hat{a}_2^{\dagger} \sinh\theta \tag{9-4.2}$$

$$\hat{b}_2 = \hat{a}_2 \cosh\theta + \hat{a}_1^{\dagger} \sinh\theta \tag{9-4.3}$$

heta は実数を表す。このとき、新しく定義した演算子 $\hat{b}_{1,2}$ が Bose 粒子の交換関係を満たすことを示せ。

(b). (a) のとき、ハミルトニアンを新しい演算子を用いて表し、 θ を適当に決めることによって固有値を 求めよ。また、そのとき ϵ と Δ に課される条件も求めよ。

(c). Fermi 粒子のとき、(a)、(b) と同様の計算を行え。

⁶得られる式は Hartree-Fock 近似 (Hartree-Fock approximation) とよばれる。

[9-5] 平均場の安定性

[9-3]の系について、次の状態を定義する。

$$|\psi\rangle = \exp\left[\sum_{\beta} \sum_{\alpha} \left(f_{\beta\alpha} \hat{a}^{\dagger}_{\beta} \hat{a}_{\alpha} - f^{*}_{\beta\alpha} \hat{a}^{\dagger}_{\alpha} \hat{a}_{\beta} \right) \right] |\psi_{0}\rangle$$
(9-5.1)

 $f_{\beta\alpha}$ は適当な複素数パラメータ、 α は α_i のいずれか、 β はそれら以外のラベルを表す。

(a). 状態 $|\psi_0\rangle$ は演算子 \hat{a}_β に対する真空となっている。つまり

$$\hat{a}_{\beta}|\psi_0\rangle = 0 \tag{9-5.2}$$

を満たす。 $|\psi\rangle$ が真空となるような演算子 $\hat{\hat{a}}_{\beta}$ はどのようなものか。

(b). ハミルトニアンの期待値 $\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle$ を f について展開する。[9–3] の近似を用いたとき、f について 1 次の項が消えることを示し、2 次までの展開を

$$\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle \sim \langle \psi_0 | \hat{H} | \psi_0 \rangle + \sum_{\alpha \alpha' \beta \beta'} \begin{pmatrix} f_{\beta \alpha}^* & f_{\beta \alpha} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_{\beta \alpha, \beta' \alpha'} & B_{\beta \alpha, \beta' \alpha'} \\ B^*_{\beta \alpha, \beta' \alpha'} & A^*_{\beta \alpha, \beta' \alpha'} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f_{\beta' \alpha'} \\ f^*_{\beta' \alpha'} \end{pmatrix}$$
(9-5.3)

と書いたときの係数 $A_{\beta\alpha,\beta'\alpha'}$ 、 $B_{\beta\alpha,\beta'\alpha'}$ を求めよ。 α 、 α' は α_i のいずれか、 β 、 β' はそれら以外のラベルを表す。

上の式にあらわれる行列は平均場解の安定性を特徴づける。固有値が非負であることが安定性の条件となる。

第10章 多体系の量子力学:磁性

前章では電子が原子核に束縛されず自由に動き回れる模型を考えた。逆に電子が各原子に束縛されてほ とんど動けない場合を考えよう。このような系では電子は自由粒子とみなすことができない。したがって、 (9.4)式(116ページ)のように場の演算子を平面波で展開することは間違いではないが有用ではない。各 原子の位置に局在した波動関数を考えるのが自然となる。そのような展開基底を用いることによって、磁 性相互作用が生じることを見る。

本講義では固体の詳しい構造まで立ち入るつもりはない。詳しくは固体物理学の講義で補ってほしい。こ こでは本質の部分のみを議論することにする。

10.1 強結合模型

10.1.1 強結合模型

前節では場の演算子を用いたハミルトニアンの表現を考えた。場の演算子は適当な基底関数 $\phi_i(\mathbf{r})$ を用いて展開することができる。

$$\hat{\psi}_{\sigma}(\boldsymbol{r}) = \sum_{i} \hat{a}_{i,\sigma} \phi_{i}(\boldsymbol{r})$$
(10.1)

演算子 $\hat{a}_{i,\sigma}$ は 1 粒子状態 i の消滅演算子を表す。ここではスピン 1/2 の Fermi 粒子を考え、 $\sigma = \pm$ はその 自由度を表す。原理的には基底関数をどのようにとろうとも自由である。完全性を満たすような関数の組 であれば何でもよいが、問題に応じて適切な基底を選ぶことは、個々の現象を捉えるためには重要なこと である。前章の例では i は平面波の波数 k を表していた。相互作用の影響が小さい系ではそのような平面 波基底が有効となる。

どのような基底をとるか議論する前に、1 粒子ポテンシャル U および相互作用ポテンシャル V をもつハ ミルトニアンを書き下すと

$$\hat{H} = \sum_{i,j} \sum_{\sigma} t_{ij} \hat{a}^{\dagger}_{i,\sigma} \hat{a}_{j,\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{i,i',j,j'} \sum_{\sigma,\sigma'} v_{ii'j'j} \hat{a}^{\dagger}_{i,\sigma} \hat{a}^{\dagger}_{i',\sigma'} \hat{a}_{j',\sigma'} \hat{a}_{j,\sigma}$$
(10.2)

である。係数は次のように積分で表される。

$$t_{ij} = \int d^3 \boldsymbol{r} \, \phi_i^*(\boldsymbol{r}) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \boldsymbol{\nabla}^2 + U(\boldsymbol{r}) \right) \phi_j(\boldsymbol{r}) \tag{10.3}$$

$$v_{ii'j'j} = \int \mathrm{d}^3 \boldsymbol{r} \mathrm{d}^3 \boldsymbol{r}' \,\phi_i^*(\boldsymbol{r}) \phi_{i'}^*(\boldsymbol{r}') V(|\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}'|) \phi_{j'}(\boldsymbol{r}') \phi_j(\boldsymbol{r})$$
(10.4)

ハミルトニアンの第1項は状態が j から i に遷移する過程を記述し、第2項は相互作用項を表している。ポ テンシャルや相互作用がスピンに依存するときは基底関数もスピンに依存したものをとるのが自然であり、 t や U もスピンに依存する。ここでは簡単のためにスピンによらないものを考えている。ところが、それで もスピンに依存する有効相互作用が生じるのである。実のところ、それが本章の主な目的である。単純な 相互作用でも多体量子効果によって複雑な有効相互作用を生みだすことがある。そのような例として、電 子間相互作用から磁性相互作用が生じる機構を調べる。

電子が原子に強く束縛されているような系では、波動関数は各原子の位置に局在したものとなる。つまり、 *i* は各原子の位置とみなすことができる¹。*t_{ij}* は異なる原子間を遷移する過程とみなすことができる。*i* と*j* の

¹ここの議論はかなりの省略がある。詳しくは Bloch の定理や Wannier 関数をキーワードにして調べてみてほしい。

位置が近いほど遷移振幅が大きく移りやすい。このような表現に基づいた模型は強結合模型(tight-binding model)とよばれている。

10.1.2 交換相互作用

相互作用は $V_{ii'jj'}$ のふるまいによって決まる。iが局在している点を表すと考えると、もっとも重要なのはi = j、i' = j'の寄与であろう。 $i = j \neq i' = j'$ とすると

$$\frac{1}{2} \sum_{\substack{i,i'\\(i\neq i')}} \sum_{\sigma,\sigma'} v_{ii'i'} \hat{a}^{\dagger}_{i,\sigma} \hat{a}^{\dagger}_{i',\sigma'} \hat{a}_{i',\sigma'} \hat{a}_{i,\sigma} = \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,i'\\(i\neq i')}} \sum_{\sigma,\sigma'} v_{ii'i'} \hat{a}^{\dagger}_{i,\sigma} \hat{a}_{i,\sigma} \hat{a}^{\dagger}_{i',\sigma'} \hat{a}_{i',\sigma'}$$
(10.5a)

$$= \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,i'\\(i\neq i')}}^{i,i'} v_{ii'i'} \hat{n}_i \hat{n}_{i'}$$
(10.5b)

と書ける。 *î*_i は状態 *i* にある粒子数を数える演算子である。

$$\hat{n}_i = \sum_{\sigma} \hat{a}_{i,\sigma}^{\dagger} \hat{a}_{i,\sigma} \tag{10.6}$$

この項は前章でも述べたように 2 点の密度に応じて決まるそれらの間の相互作用であり、理解しやすい。 i = j = i' = j'とすると、Pauliの排他律により粒子は同じ状態を占めることができないからスピン座標 が異なる値をとる。相互作用は次のように書ける。

$$\frac{1}{2}\sum_{i}\sum_{\sigma,\sigma'} v_{iiii}\hat{a}^{\dagger}_{i,\sigma}\hat{a}_{i,\sigma}\hat{a}^{\dagger}_{i,\sigma'}\hat{a}_{i,\sigma'} = \sum_{i} v_{iiii}\hat{n}_{i,+}\hat{n}_{i,-}$$
(10.7)

 $\hat{n}_{i,\pm}$ は各スピン状態についての数演算子である。

$$\hat{n}_{i,\pm} = \hat{a}_{i,\pm}^{\dagger} \hat{a}_{i,\pm} \tag{10.8}$$

この項は同じ状態を占めるスピン間の相互作用を表している。Coulomb 相互作用のように相互作用関数 V が正の系では v_{ii'i'i} も正になるのでこれらは斥力相互作用を表す。特に、後者の相互作用は同じ状態 i を粒 子が占めることを妨げる寄与をもたらす。以下で議論する Hubbard 模型では最も重要な寄与として扱われ る相互作用である。

状態を反対称化したことにより生じる量子力学ならではの寄与は $i = j' \neq i' = j$ の項から生じる。

$$\frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j \\ (i\neq j)}} \sum_{\sigma,\sigma'} v_{ijij} \hat{a}^{\dagger}_{i,\sigma} \hat{a}^{\dagger}_{j,\sigma'} \hat{a}_{i,\sigma'} \hat{a}_{j,\sigma}$$
(10.9)

演算子部分は、軌道を表すi、jの指標とスピンを表す σ 、 σ' の指標が異なる対をつくっているために二つ に単純に分解できない。つまり、粒子のもつスピン状態に強く依存するような相互作用である。次の演算 子を導入する。

$$\hat{\boldsymbol{S}}_{i} = \frac{\hbar}{2} \sum_{\alpha,\beta=1}^{2} \hat{a}_{i,\alpha}^{\dagger} (\hat{\boldsymbol{\sigma}})_{\alpha\beta} \hat{a}_{i,\beta}$$
(10.10)

 $\hat{\boldsymbol{\sigma}} = (\hat{\sigma}^x, \hat{\sigma}^y, \hat{\sigma}^z)$ は Pauli 行列であり次のように書ける。

$$\hat{\sigma}^x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \qquad \hat{\sigma}^y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \qquad \hat{\sigma}^z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$
(10.11)

添字 α 、 β はこの行列の成分を表している。このとき、導入した演算子は次の交換関係を満たす(問題 [10-1])。

$$[\hat{S}_i^{\mu}, \hat{S}_j^{\nu}] = i\hbar\delta_{i,j}\sum_{\lambda}\epsilon_{\mu\nu\lambda}\hat{S}_i^{\lambda}$$
(10.12)

つまり、これらはスピン演算子を表している。 \hat{S}_i^2 の固有値は $3\hbar^2/4$ であるので、スピン 1/2の演算子である。スピン演算子を用いると、(10.9) 式は

$$\frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j \\ (i\neq j)}} \sum_{\sigma,\sigma'} v_{ijij} \hat{a}_{i,\sigma}^{\dagger} \hat{a}_{j,\sigma'}^{\dagger} \hat{a}_{i,\sigma'} \hat{a}_{j,\sigma} = -\frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j \\ (i\neq j)}} \sum_{\sigma,\sigma'} v_{ijij} \hat{a}_{i,\sigma}^{\dagger} \hat{a}_{i,\sigma'} \hat{a}_{j,\sigma'} \hat{a}_{j,\sigma}$$
(10.13a)

$$= -\sum_{\substack{i,j\\(i\neq j)}} J_{ij} \left(\hat{\boldsymbol{S}}_i \cdot \hat{\boldsymbol{S}}_j + \frac{\hbar^2}{4} \hat{n}_i \hat{n}_j \right)$$
(10.13b)

と書くことができる。係数を $J_{ij} = v_{ijij}/\hbar^2$ とおいた。

$$v_{ijij} = \int \mathrm{d}^3 \boldsymbol{r} \mathrm{d}^3 \boldsymbol{r}' \, V(|\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}'|) (\phi_i(\boldsymbol{r}) \phi_j^*(\boldsymbol{r}))^* \phi_i(\boldsymbol{r}') \phi_j^*(\boldsymbol{r}')$$
(10.14)

であるから相互作用が短距離で大きくなる斥力の場合、 J_{ij} は正の量となる²。スピンの項 $\hat{S}_i \cdot \hat{S}_j$ は、この 内積が正になる方がエネルギーが低くなる。つまり二つのスピンが同じ向きに揃う方がエネルギーが低い。 このような相互作用を強磁性相互作用(ferromagnetic interaction)という。1/2の二つのスピンがそろう ということは二つのスピンは合成スピン1をもつ。合成スピン0は必ず反対称になるからである。波動関 数は全体として反対称になる必要があるので、軌道部分の波動関数は反対称となる。斥力があると粒子は 近づかないほうが得をする。粒子は同じ点に存在することができないから波動関数が対称であるより反対 称になる方が得をする。その結果、スピンについてはスピンが揃いやすい強磁性的な相互作用をもたらす。

このようにして局在した各粒子は交換相互作用(exchange interaction)を行う。上で見たように、相互 作用にはさまざまなタイプのものが存在する。系によってそれぞれがどれくらい寄与するかは異なり、問 題に応じて特定の項を取り出して調べることが多い。

10.1.3 超交換相互作用*

交換相互作用により強磁性相互作用がもたらされることを前節で見たが、相互作用の高次の寄与を考慮 するとさまざまなタイプの寄与がもたらされる。ここではその一例として超交換相互作用(superexchange interaction)を調べる。摂動展開の方法を用いて摂動の2次の寄与を考える。

相互作用が十分短距離で強い系を考える。その場合、 V_{iiii} の局所的な相互作用が主な寄与をする。 t_{ij} の項を摂動として扱い、非局所的な効果をとりいれる。計算を簡単にするためi = 1, 2の寄与のみを考えると、無摂動ハミルトニアン \hat{H}_0 と摂動ハミルトニアン \hat{V} は次のように書ける。

$$\hat{H}_0 = U\left(\hat{n}_{1+}\hat{n}_{1-} + \hat{n}_{2+}\hat{n}_{2-}\right) \tag{10.15}$$

$$\hat{V} = t \sum_{\sigma} \left(\hat{a}_{1\sigma}^{\dagger} \hat{a}_{2\sigma} + \hat{a}_{2\sigma}^{\dagger} \hat{a}_{1\sigma} \right)$$
(10.16)

 $U = V_{iiii}$ 、 $t = t_{12}$ である。斥力相互作用の場合 U は正である。 t_{11} や t_{22} を残してもよいが自明な対角項 であることがわかるのでここでは省略する。

2 粒子の系を考えて、基底状態のエネルギーを調べよう。状態は点 1 と 2 に粒子をつめたもので表される。スピン自由度および Pauli の排他律を考慮すると状態は 6 通りある。 \hat{H}_0 の固有値と固有状態によって次のように書くことができる。

基底状態:
$$E_0^{(0)} = 0;$$
 $\hat{a}_{1+}^{\dagger} \hat{a}_{2+}^{\dagger} |0\rangle,$ $\hat{a}_{1+}^{\dagger} \hat{a}_{2-}^{\dagger} |0\rangle,$ $\hat{a}_{1-}^{\dagger} \hat{a}_{2+}^{\dagger} |0\rangle,$ $\hat{a}_{1-}^{\dagger} \hat{a}_{2+}^{\dagger} |0\rangle,$
第一励起状態: $E_1^{(0)} = U;$ $\hat{a}_{1+}^{\dagger} \hat{a}_{1-}^{\dagger} |0\rangle,$ $\hat{a}_{2+}^{\dagger} \hat{a}_{2-}^{\dagger} |0\rangle$

²Coulomb 力の場合、正になることを問題 [7-4] で示した。

である。対角行列であり、対角成分がそれぞれの状態のエネルギーを与える。摂動項は次のように書ける。

$$\hat{V} = \begin{pmatrix}
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & t & t \\
0 & 0 & 0 & 0 & -t & -t \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & t & -t & 0 & 0 & 0 \\
0 & t & -t & 0 & 0 & 0
\end{pmatrix}$$
(10.18)

あとは摂動の公式に従って計算を行えばよい。縮退があるので縮退のあるときの公式を適用する必要がある。 エネルギーへの摂動の1次の補正は、縮退している空間内で摂動項を対角化したときの対角成分によっ て与えられる。上の行列表示を見ると4×4と2×2の各ブロックで全ての成分は0なのでエネルギー固有 値の1次補正は全て0となる。これは次のように書ける。

$$\hat{P}_n \hat{V} \hat{P}_n = 0 \tag{10.19}$$

 \hat{P}_n は準位nの状態空間への射影演算子を表す。

状態の1次補正を考慮しても縮退は解けていないのでより高次の効果を考慮する必要がある。これは問題[3-6]の状況を扱っていることに相当する。第3章ではその場合の議論を省略したが、次の行列を対角化 することによって得られる。

$$\hat{V}\hat{Q}_n \frac{1}{E_n^{(0)} - \hat{H}_0} \hat{Q}_n \hat{V}$$
(10.20)

 $\hat{Q}_n=1-\hat{P}_n$ は考えている準位nの状態空間以外へ状態を射影する演算子を表す。基底状態の場合に計算してみると

$$\hat{V}\hat{Q}_{0}\frac{1}{E_{0}^{(0)}-\hat{H}_{0}}\hat{Q}_{0}\hat{V} = -\frac{2t^{2}}{U}\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0\\ 0 & 1 & -1 & 0\\ 0 & -1 & 1 & 0\\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$
(10.21)

を得る。この行列を対角化することでエネルギー固有値と固有状態が得られる。固有値の補正は $0 \ge -4t^2/U$ で与えられる。0の場合の状態は

$$\hat{a}_{1+}^{\dagger}\hat{a}_{2+}^{\dagger}|0\rangle \tag{10.22}$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \left(\hat{a}_{1+}^{\dagger} \hat{a}_{2-}^{\dagger} + \hat{a}_{1-}^{\dagger} \hat{a}_{2+}^{\dagger} \right) |0\rangle \tag{10.23}$$

$$\hat{a}_{1-}^{\dagger}\hat{a}_{2-}^{\dagger}|0\rangle \tag{10.24}$$

 $-4t^2/U$ の場合は

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \left(\hat{a}_{1+}^{\dagger} \hat{a}_{2-}^{\dagger} - \hat{a}_{1-}^{\dagger} \hat{a}_{2+}^{\dagger} \right) |0\rangle \tag{10.25}$$

となる。

それぞれの状態を見てみると、ちょうど合成スピンの状態になっていることがわかるだろう。合成スピン1の状態が補正エネルギー0となり、合成スピン0が補正エネルギー-4t²/Uを与える。斥力相互作用のときUは正であるから、前節の例とは逆にスピン部分が反対称である方がエネルギーが低くなる。

摂動の各項で扱われる (10.20) 式のような演算子は有効相互作用として表現される。今の場合、無摂動ハ ミルトニアンの基底状態の状態空間でこの演算子は (10.10) 式で導入した 1/2 のスピン演算子を用いて表 すことができる。合成スピンの関係

$$(\hat{S}_1 + \hat{S}_2)^2 = \frac{3}{2}\hbar^2 + 2\hat{S}_1 \cdot \hat{S}_2$$
(10.26)

を用いて

$$\hat{V}\hat{Q}^{(1)}\frac{1}{E_1^{(0)} - \hat{H}_0}\hat{Q}^{(1)}\hat{V} = \frac{t^2}{U}\left(\frac{4}{\hbar^2}\hat{S}_1\cdot\hat{S}_2 - 1\right)$$
(10.27)

となる。交換相互作用のときと同じように二つのスピンの内積があらわれるが、係数の符号は逆である。つまりこの場合、反強磁性相互作用(antiferromagnetic interaction)を与える。

ここでは準位を二つに限ったが、一般の場合も同様にして扱うことができる。*t_{ij}*を最近節の対 *ij* に限り、相互作用を局所的な相互作用のみをとりいれたハミルトニアン

$$\hat{H} = t \sum_{\langle i,j \rangle} \sum_{\sigma} \left(\hat{a}_{i,\sigma}^{\dagger} \hat{a}_{j,\sigma} + \hat{a}_{j,\sigma}^{\dagger} \hat{a}_{i,\sigma} \right) + U \sum_{i} \hat{n}_{i,+} \hat{n}_{i,-}$$
(10.28)

は、Hubbard 模型(Hubbard model)とよばれている。この模型を用いて強相関電子系のさまざまな性 質を理解するこころみが多くなされている。上で示した反強磁性相互作用の導出がその一例である。

ここで行った有効相互作用の導出は摂動展開の方法を用いている。摂動展開の基本的な目的はずれを定 量的に計算することであるが、有効相互作用を導出する手法にもなる。これが本節で得た教訓である。

10.2 磁性体の模型

前節で導いたスピン演算子によってあらわされる相互作用は、磁性体を理解する標準模型となる。スピンが各点に局在しており、それらは強磁性または反強磁性の相互作用を行う。次のようなハミルトニアンを考えてみよう。

$$\hat{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{\boldsymbol{S}}_i \cdot \hat{\boldsymbol{S}}_j \tag{10.29}$$

最近接間のスピンは – J の相互作用を行う。

J>0のとき、相互作用は強磁性的である。このときスピンはお互いに同じ状態をとった方がエネルギー を得する。つまり、基底状態は

$$|\psi_0\rangle = \begin{cases} \prod_i |+\rangle_i \\ \prod_i |-\rangle_i \end{cases}$$
(10.30)

となる。ここでスピン演算子の固有状態を

$$\hat{S}_i^z |\pm\rangle_i = \pm \frac{\hbar}{2} |\pm\rangle_i \tag{10.31}$$

と定義した。スピンの各成分はお互いに交換しないので適当な方向、つまり z 成分を考えその成分の固有 状態を用いている。このようにスピンは任意の方向にそろう³

式 (10.29) のハミルトニアンは Heisenberg 模型 (Heisenberg model) とよばれる。磁性体の特徴を捉 えた模型として Hubbard 模型と同様にさまざまな性質を説明するために用いられている。Heisenberg 模

³無限に縮退しているとも思えるが、お互いに独立な状態ではない。独立な状態は2つある。

型のハミルトニアンと類似の模型として Ising 模型がある。「熱・統計力学第二」において相転移の模型として扱われたものである。この場合、ハミルトニアンはスピン演算子の z 成分 \hat{S}_i^z を用いて

$$\hat{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{S}_i^z \hat{S}_j^z \tag{10.32}$$

と表される。 \hat{S}_i^z は $\pm \hbar/2$ の値をとる。 $\hat{S}_i^z = \frac{\hbar}{2}\hat{\sigma}_i$ ととるとスピン変数を $\sigma_i(=\pm 1)$ とした Ising 模型の標準形が得られる。

Ising 模型も J > 0 では強磁性状態、つまりスピンがそろった状態(全て +1 か全て -1)が基底状態になる。J < 0 の場合、スピンが規則的に並んでいるとき隣り合ったスピンが逆向きになった方がエネルギーを得をする。つまり基底状態は反強磁性体を表す。簡単のため、1次元の直線上に等距離で並んだ系を考えると、基底状態は

$$|\psi_0\rangle = \begin{cases} |+\rangle_1|-\rangle_2|+\rangle_3|-\rangle_4\cdots\\ |-\rangle_1|+\rangle_2|-\rangle_3|+\rangle_4\cdots \end{cases}$$
(10.33)

となるだろう。このような状態を Néel 状態 (Néel state) とよぶ。

Ising 模型の場合、Néel 状態は基底状態となる。ところが、Heisenberg 模型の場合、Néel 状態は基底状態ではない。そもそも固有状態となっていないのである。固有状態になっていないことは (10.29) 式のハミルトニアンを Néel 状態に作用させればすぐにわかる。なぜ固有状態になっていないのかを考えると、量子系の複雑さが見えてくる。

強磁性系の場合、基底状態はスピンが揃い磁化(magnetization)をもつ。磁化はスピン演算子の和で定義される。 z 方向を揃う方向とすると、磁化の演算子は

$$\hat{M} = \sum_{i} \hat{S}_{i}^{z} \tag{10.34}$$

と定義され、基底状態はスピン数を N として固有値 Nħ/2 をもつ。基底状態はハミルトニアンと磁化の同時固有状態である。つまり、二つの演算子は交換する。

$$[\hat{H}, \hat{M}] = 0 \tag{10.35}$$

磁化は磁性体の模型を熱力学的に考えたときに秩序変数として扱われるものである。秩序変数は系の熱力 学的状態を特徴づける基本的な物理量となる。

反強磁性体の場合にはどのようになるだろうか。スピンが規則的に互い違いに並んでいるとき、それを 測る秩序変数演算子はやはり互い違いにスピンを測るものとなる。

$$\hat{M}_{\rm s} = \sum_{i} (-1)^{i} \hat{S}_{i}^{z} \tag{10.36}$$

i はとなりあったスピンがそれぞれ偶数と奇数であるように適当にラベルづけを行っている⁴。これを交替 磁化(staggered magnetization)とよぶ⁵。強磁性体の場合と異なるのは、交替磁化はハミルトニアンと交 換しないことである。

$$[\hat{H}, \hat{M}_{\rm s}] \neq 0 \tag{10.37}$$

つまり、Néel 状態は交替磁化の固有状態となるがハミルトニアンの固有状態ではない。ほしいのはハミルトニアンの固有状態であるから、基底状態は Néel 状態とは異なるものとなるはずである。Ising 模型のハミルトニアンの場合、ハミルトニアンはスピンの z 成分のみしか含まれていないため、交替磁化と交換し、Néel 状態が基底状態となる。Heisenberg 模型では z 成分以外の演算子も含まれているために交替磁化と交換しなくなる。演算子の非可換性が量子系の非自明さをもたらすことをこれまでにいろいろな例で見てき

⁴したがって、1次元や正方・立方格子のような格子の頂点上にスピンが並んでいる系を想定している。三角格子のような場合に は困ってしまう。

⁵stagger は互い違いに少しずつずらせて配置するという意味をもつ。

たが、このことは統計力学の系にも適用される。このような量子効果は低温での物理量のふるまいに反映 される。

反強磁性体の場合に基底状態がどのようになっているかは、スピンが二つしかない系を考えてみるとお およその見当がつく。ハミルトニアン

$$\hat{H} = |J|\hat{\boldsymbol{S}}_1 \cdot \hat{\boldsymbol{S}}_2 \tag{10.38}$$

の固有状態は合成スピン $\hat{S} = \hat{S}_1 + \hat{S}_2$ の固有状態でもある。基底状態は合成スピン0の状態である。

$$|\psi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|+\rangle_1|-\rangle_2 - |-\rangle_1|+\rangle_2\right)$$
 (10.39)

このように、系の固有状態は二つの Néel 状態の重ねあわせで与えられる⁶。どちらかの項だけ取り出して も固有状態とはなっていない。重ねあわせの状態は量子力学ならではのものであり、古典的に対応する状態は存在しない。2 体以上の多体系でも状態の重ねあわせを考える必要があると容易に予想できる。

このような重ねあわせの状態の非自明さは量子力学の最大の特徴となる。これが次の第 III 部の主なテーマとなる。

⁶スピン数が2より大きいときはもっと複雑なものとなる。

10.3 問題

 $[\mathbf{A}]$

[10-1] スピン演算子

(a). 次の演算子を定義する。

$$\hat{S}^x = \frac{\hbar}{2} \left(\hat{a}^{\dagger} \hat{b} + \hat{b}^{\dagger} \hat{a} \right) \tag{10-1.1}$$

$$\hat{S}^y = -\frac{i\hbar}{2} \left(\hat{a}^\dagger \hat{b} - \hat{b}^\dagger \hat{a} \right) \tag{10-1.2}$$

$$\hat{S}^z = \frac{\hbar}{2} \left(\hat{a}^{\dagger} \hat{a} - \hat{b}^{\dagger} \hat{b} \right) \tag{10-1.3}$$

 \hat{a} 、 \hat{b} はそれぞれ Fermi 粒子の消滅演算子を表す。このときこれらの演算子がスピン演算子の交換関係

$$[\hat{S}^{\mu}, \hat{S}^{\nu}] = i\hbar \sum_{\lambda} \epsilon_{\mu\nu\lambda} \hat{S}^{\lambda}$$
(10–1.4)

を満たすことを示せ。また、 \hat{S}^2 はどのように書けるか調べよ。

(b). (a) で Fermi 粒子の演算子を Bose 粒子のものにおきかえたとき、どのような違いがあるか調べよ。

(c). Pauli 行列が次の関係を満たすことを示せ。

$$\delta_{\alpha,\beta}\delta_{\gamma,\delta} + \boldsymbol{\sigma}_{\alpha\beta} \cdot \boldsymbol{\sigma}_{\gamma\delta} = 2\delta_{\alpha,\delta}\delta_{\beta,\gamma} \tag{10-1.5}$$

[10-2] Heisenberg 模型

Heisenberg 模型のハミルトニアン (10.29) 式を考える。

- (a). ハミルトニアンと磁化演算子(10.34)式が交換することを示せ。交替磁化(10.36)式の場合はどうか、
- (b). Néel 状態 (10.33) 式がハミルトニアンの固有状態となっていないことを示せ。

 $[\mathbf{B}]$

[10-3] 横磁場 Ising 模型

N 個の $\frac{1}{2}$ スピン演算子 $\{\hat{S}_i = \frac{\hbar}{2}\hat{\sigma}_i\}_{i=1,2,\dots,N}$ からなる 1 次元横磁場 Ising 模型を考える。

$$\hat{H} = -J \sum_{i=1}^{N} \hat{\sigma}_{i}^{z} \hat{\sigma}_{i+1}^{z} - \Gamma \sum_{i=1}^{N} \hat{\sigma}_{i}^{x}$$
(10-3.1)

J>0、 $\Gamma>0$ 、 $\hat{\sigma}_{N+1}=\hat{\sigma}_1$ とする。スピンは各座標点に固定されていると考えるので、量子統計を考える必要はない。

(a). *J* = 0 のときの基底状態および第一励起状態を考える。それらの固有状態基底を用いてハミルトニアン(*J*の項も含めたもの)を行列表示せよ。

(b). 相互作用項(Jの項)を摂動として扱ったとき、摂動の1次近似を用いて基底状態と第1励起状態の間のエネルギーギャップを求めよ。

(c). $\Gamma = 0$ のときの基底状態および第一励起状態を全て求めよ。それらの基底を用いて Γ の項がどのように書けるか考察せよ。具体的に求めず概要を説明できればよい。

[10-4] スピン系の状態

スピン演算子を[10-1]のように Bose 粒子の生成消滅演算子を用いて表す。

(a). Bose 粒子多体系の状態は次のように表される。

$$|n_a, n_b\rangle \propto (\hat{a}^{\dagger})^{n_a} (\hat{b}^{\dagger})^{n_b} |0\rangle \tag{10-4.1}$$

 n_a 、 n_b はそれぞれ非負の整数、 $|0\rangle$ は真空状態を表す。スピン演算子の固有状態 $|S,M\rangle$ を $|n_a,n_b\rangle$ を用いて表せ。

(b). 次の式を示せ。

$$\hat{U}\hat{a}^{\dagger}\hat{U}^{\dagger} = \hat{a}^{\dagger}\cos\frac{\theta}{2} + \hat{b}^{\dagger}\mathrm{e}^{i\varphi}\sin\frac{\theta}{2}$$
(10-4.2)

$$\hat{U}\hat{b}^{\dagger}\hat{U}^{\dagger} = \hat{b}^{\dagger}\cos\frac{\theta}{2} - \hat{a}^{\dagger}\mathrm{e}^{-i\varphi}\sin\frac{\theta}{2}$$
(10-4.3)

 \hat{U} はスピン空間における回転演算子

$$\hat{U} = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\theta\hat{\boldsymbol{S}}\cdot\boldsymbol{e}_{\varphi}\right) \tag{10-4.4}$$

を表す。 $e_{\varphi} = (-\sin \varphi, \cos \varphi, 0)$ である。

(c).2種類のスピンからなる系において次の状態を考える。

$$|\psi(N)\rangle = \left(\hat{a}_{1}^{\dagger}\hat{b}_{2}^{\dagger} - \hat{b}_{1}^{\dagger}\hat{a}_{2}^{\dagger}\right)^{N}|0\rangle$$
(10-4.5)

添字 1, 2 がそれぞれのスピンを表す。N は非負の整数である。各スピンはどのような量子数をもつか調 べよ。

(d). 式 (10-4.5) の状態は次のユニタリー変換に対して不変であることを示せ。

$$\hat{U} = \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\theta(\hat{S}_1 + \hat{S}_2) \cdot e_{\varphi}\right]$$
(10-4.6)

その結果からどのようなことが言えるか考察せよ。

 $[\mathbf{C}]$

[10-5] 強磁性スピン波

強磁性量子 Heisenberg 模型

$$\hat{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} \hat{\boldsymbol{S}}_i \cdot \hat{\boldsymbol{S}}_j \tag{10-5.1}$$

を考える。J>0である。スピン量子数はSとする ($\hat{S}_i^2=S(S+1)\hbar^2$)。また、格子は3次元立方格子を考える。

- (a). 基底状態のエネルギー E₀ を求めよ。
- (b). スピン演算子を次のようにおく。

$$\hat{S}_{i}^{x} + i\hat{S}_{i}^{y} = \hbar \sqrt{2S - \hat{b}_{i}^{\dagger} \hat{b}_{i}} \hat{b}_{i}$$
(10–5.2)

$$\hat{S}_{i}^{z} = \hbar (S - \hat{b}_{i}^{\dagger} \hat{b}_{i}) \tag{10-5.3}$$

 \hat{b}_i が Bose 演算子であることを示せ。

(c). 演算子 \hat{b}_i を離散 Fourier 変換する。

$$\hat{b}_i = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\boldsymbol{k}} \hat{b}_{\boldsymbol{k}} \mathrm{e}^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}_i} \tag{10-5.4}$$

$$\hat{b}_{\boldsymbol{k}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{i} \hat{b}_{i} \mathrm{e}^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}_{i}}$$
(10-5.5)

このとき、ハミルトニアン演算子が次のように書けることを示せ。

$$\hat{H} = E_0 + \sum_{\boldsymbol{k}} \hbar \omega(\boldsymbol{k}) \hat{b}^{\dagger}_{\boldsymbol{k}} \hat{b}_{\boldsymbol{k}} + O(S^{-1})$$
(10-5.6)

Sが大きいとして1/Sの展開を行っていることに注意せよ。また、 $\omega({\bf k})$ の $|{\bf k}|$ が小さいところのふるまいを求めよ。

(d). ハミルトニアンを (10-5.6) 式で近似したとき、低温で比熱が T^{3/2} に比例していることを示せ。

第III部

量子力学の原理をめぐって
第11章 密度演算子

第 III 部ではこれまでとは異なる視点から量子力学の本質を探る。そのために、本章では準備として密度 演算子の導入を行う。Hilbert 空間上のベクトル |ψ⟩ を用いて記述されてきた系の状態を演算子で表したも のが密度演算子である。密度演算子は、量子力学的状態とはどのようなものか、量子力学で用いられる確 率と統計力学での確率の違いなどを明らかにしてくれる。

11.1 密度演算子

量子力学系の状態はベクトル $|\psi\rangle$ であらわされる。これを知ることで任意の物理量の分布関数を原理的 には得ることができる。また、状態の時間発展を記述するのが Schrödinger 方程式である。与えられた初 期状態とハミルトニアンに対して、Schrödinger 方程式は任意の時間での状態を一意的に決定する。

Hilbert 空間上のベクトルを状態の表現に用いるのはそのようにすると全てうまく説明できるからで、必 須のことではない。もしかしたら全く異なるように定式化されていたかもしれないが、いずれにしてもそ れらが同じ結果を導き出すのであればその違いに特に意味はない。好きな方を選べばいいだけである。重 要な点は、任意の物理量の確率分布がわかれば理論としては少なくとも今のところは十分であることであ る。もちろん、長い年月をかけて今の表現に落ち着いたのであるから、異なる表現を探るのは多くの場合 徒労に終わるだろう。とはいえ、量子力学にはいくつかの表現方法が存在する。例えば、経路積分の方法 はそのひとつである。本章では、状態を演算子で表す。これまでと大きく記述方法が変わるわけではない が、いくつかの利点があり、次章以降でも頻繁に用いる。

序章でも議論したが、量子力学の原理を簡単に復習しよう。物理量 X が x をとる確率分布は

$$P(x) = \sum_{n} \delta(x - x_n) p_n \tag{11.1}$$

で与えられる。*x_n*は*X*がとりうる値、*p_n*はその値を得る確率を表す。*X*のとりうる値は離散的としたが、 連続であってもよい。分布関数を用いれば期待値は

$$\int \mathrm{d}x \, x P(x) = \sum_{n} x_n p_n \tag{11.2}$$

と書けるし、分散やより複雑な関数も原理的には計算することが可能である。量子力学の体系はこの分布 関数を得るためにある。量子力学では物理量 X を演算子 \hat{X} で表しそれが作用する空間を状態 $|\psi\rangle$ で表す。 期待値は

$$\langle \hat{X} \rangle = \langle \psi | \hat{X} | \psi \rangle \tag{11.3}$$

と表される。 \hat{X} がとりうる値の x_n は演算子の固有値に等しい。固有状態を $|n\rangle$ とすると、 p_n は次のよう に書ける。

$$p_n = |\langle n|\psi\rangle|^2 \tag{11.4}$$

つまり、分布関数は

$$P(x) = \langle \psi | \delta(x - \hat{X}) | \psi \rangle = \sum_{n} \langle \psi | \delta(x - \hat{X}) | n \rangle \langle n | \psi \rangle = \sum_{n} \delta(x - x_n) p_n$$
(11.5)

とあらわされる。

分布関数を求めることができるのであれば、 $|\psi\rangle$ の代わりに別の量を考えてもよい。 $\langle n|\psi\rangle$ のような量は 確率振幅とよばれ、その絶対値の2乗が確率を与える。確率振幅を考えるのは位相の不定性が生じ無駄に 思えるが、そのような冗長性を許すことによって干渉効果のような量子力学ならではの現象を得ることが できたのはこれまでに見てきた通りである。

本章では次のような演算子を考える。

$$\hat{\rho} = |\psi\rangle\langle\psi| \tag{11.6}$$

これが密度演算子(density operator)である。状態を並べたものであるが、ケットとブラの並びから内積 ではなくて演算子である。有限次元の系では行列として書くことができるため、密度行列(density matrix) ともよばれる。内積をとっておらず状態ベクトルの構造は保たれているので、干渉効果を記述することは 以下で見るように可能である。一方で、状態を二つかけたものであるから位相の不定性は生じない。

密度演算子を用いると物理量の期待値は

$$\langle \hat{X} \rangle = \operatorname{Tr} \hat{X} \hat{\rho}$$
 (11.7)

と書ける。右辺はトレースを表しており、完全系を用いて期待値の和をとる。 \hat{X} の固有状態 $|n\rangle$ を完全系として用いると

$$\operatorname{Tr} \hat{X}\hat{\rho} = \sum_{n} \langle n|\hat{X}\hat{\rho}|n\rangle = \sum_{n} x_n \langle n|\hat{\rho}|n\rangle = \sum_{n} x_n p_n \tag{11.8}$$

となって確かに期待値を与える。分布関数も同様に密度演算子を用いて計算できる。1 粒子系を考えて座 標演算子の固有状態ではさむと

$$\langle \boldsymbol{r}|\hat{\rho}|\boldsymbol{r}'\rangle = \psi(\boldsymbol{r})\psi^*(\boldsymbol{r}') \tag{11.9}$$

と書ける。r = r'とおけば波動関数の絶対値の 2 乗、つまり、点 r での存在確率密度を与える。 $r \neq r'$ の場合を考えれば、波動関数の位相の情報も定数位相の不定性を除いて得ることができる。 時間発展は時間発展演算子を両側からかければよい。

$$\hat{\rho}(t) = |\psi(t)\rangle\langle\psi(t)| = \hat{U}(t)\hat{\rho}\hat{U}^{\dagger}(t)$$
(11.10)

 $\hat{
ho}$ は初期時間での密度演算子を表す。運動方程式を得るために時間微分を行うと

$$i\hbar \frac{\partial \hat{\rho}(t)}{\partial t} = [\hat{H}(t), \hat{\rho}(t)]$$
(11.11)

となる。 $\hat{H}(t)$ は時間 t でのハミルトニアンを表す。この方程式は von Neumann 方程式 (von Neumann equation)とよばれる¹。Schrödinger 方程式の代わりに状態の時間発展を決定するものとなる。

状態が規格化されていることを反映して密度演算子はいくつかの性質をもつ。次の性質が示される(問題[11-1])²。

(i) $\operatorname{Tr} \hat{\rho} = 1$

(ii)
$$\hat{\rho}^2 = \hat{\rho}$$

¹Heisenberg 方程式とは符号が異なることに注意。今考えているのは Schrödinger 描像である。Heisenberg 描像では密度演算子は時間によらない。

²問題 [5-5] の性質も参照。

11.2 純粋状態と混合状態

11.2.1 確率分布と密度演算子

密度演算子を用いると量子力学的状態が確率的に定められることの意味がよくわかる。例えばある演算 子の二つの固有状態 |0>、 |1> の線形結合で表される状態を考える。

$$|\psi\rangle = a|0\rangle + b|1\rangle \tag{11.12}$$

演算子によって表される物理量を測定したとき、 $|0\rangle$ に対応する固有値を確率 $|a|^2$ 、 $|1\rangle$ の固有値を $|b|^2$ で得る³。 $|a|^2 + |b|^2 = 1$ である。状態としては完全に決まっているが、物理量が確定した値をとるかどうかは定まっていない。密度演算子は

$$\hat{\rho} = |a|^2 |0\rangle \langle 0| + |b|^2 |1\rangle \langle 1| + ab^* |0\rangle \langle 1| + a^* b |1\rangle \langle 0|$$
(11.13)

と書ける。最後二つの項は演算子を行列表示したときの非対角成分を表す。これは重ねあわせの状態を考 えたことによって生じるものであり、干渉効果を表すと考えられる。

非対角項の役割を考えるために、最後二つの項がない場合、つまり

$$\hat{\rho}' = |a|^2 |0\rangle \langle 0| + |b|^2 |1\rangle \langle 1| \tag{11.14}$$

と書ける場合を考えてみよう。これは密度演算子と呼べるだろうか?まず、すぐわかるのは前節で挙げた 三つの性質のうち満たされるのは(i)のみであることである。式(11.7)を考えてみると

$$\operatorname{Tr} \hat{X} \hat{\rho}' = |a|^2 \langle 0|\hat{X}|0\rangle + |b|^2 \langle 1|\hat{X}|1\rangle \tag{11.15}$$

と書ける。これは二つの状態がそれぞれ確率 |a|²、|b|² で混ざった系であると見ることができる。この場合の確率は量子力学的というより、単純に二つの状態がある確率でまざっている状態であると見ることができる。状態が定まっておらず、どちらの状態が実現されるかわからないという解釈である。これは古典的にも理解できるものである。

一般化すると、拡張された密度演算子は

$$\hat{\rho} = \sum_{i} p_{i} |\psi_{i}\rangle \langle\psi_{i}| \tag{11.16}$$

という形で書かれる。 p_i は非負の実数で $\sum_i p_i = 1$ を満たす。つまり、 p_i は確率分布を表す。これは系が確率 p_i で状態 $|\psi_i\rangle$ にあるような状態の統計集団を考えることを意味している。このときの物理量 X の期待値は

$$\langle \hat{X} \rangle = \operatorname{Tr} \hat{X} \hat{\rho} = \sum_{i} p_i \langle \psi_i | \hat{X} | \psi_i \rangle \tag{11.17}$$

と書ける。 $\langle \psi_i | \hat{X} | \psi_i
angle$ は状態 $| \psi_i
angle$ における \hat{X} の期待値を表している。

前節で考えた密度演算子は、あるひとつの*i*に対して $p_i = 1$ で残りは0の場合に対応している。このような状態を純粋状態 (pure state) とよぶ。純粋状態 $\hat{\rho} = |\psi\rangle\langle\psi|$ では状態は $|\psi\rangle$ に一意的に決まっている。 一方、純粋状態でない状態は混合状態 (mixed state) とよばれる。混合状態は確率分布 $\{p_i\}$ によって各状態 $|\psi_i\rangle$ にいる確率が決まる。これは系がどの状態にいるかわからないことを意味する。純粋状態と混合状態の数学的な定義の違いは次節で詳しく議論する。

混合状態における各状態 $|\psi_i\rangle$ は一般にさまざまなものがまじっている。 $|\psi_i\rangle$ は規格化された状態である が、互いに直交するものである必要はない。つまり完全系のような展開とは異なる。したがって、和の数 も Hilbert 空間の次元とは一般に一致しない。大きくも小さくもなる。混合状態における確率分布の典型

 $^{{}^{3}\}langle 0|0\rangle = \langle 1|1\rangle = 1, \langle 0|1\rangle = 0$ & bt.

的な例としては統計力学の確率分布模型を考えるとよい。カノニカル分布では、*E_i*を状態*i*のもつエネル ギーとすると確率分布は次のように与えられる。

$$p_i = \frac{1}{Z} e^{-\beta E_i}, \qquad Z = \sum_i e^{-\beta E_i}$$
(11.18)

βは逆温度を表す。Ζは分配関数である。密度演算子は

$$\hat{\rho} = \frac{1}{Z} \sum_{i} e^{-\beta E_i} |\psi_i\rangle \langle\psi_i|$$
(11.19)

と書ける。 $|\psi_i\rangle$ はハミルトニアンの固有状態を表す⁴。これを用いれば物理量の熱平均は量子力学のときと 全く同じ形式で (11.17) 式のように書くことができる。

11.2.2 密度演算子の定義

純粋状態と混合状態の密度演算子を明確に区別するために、それらの数学的な定義の違いを考えてみよう。まず、性質 (i) で導いた

$$\operatorname{Tr}\hat{\rho} = 1 \tag{11.20}$$

の関係は混合状態でも成り立つ。これは確率の保存に基づく性質である。

純粋状態の場合、密度演算子の2乗は密度演算子に等しかった(性質(ii))。混合状態の場合には明らかにその性質は成り立たない。和にあらわれる状態 $|\psi_i\rangle$ が互いにどのような内積をもつか一般には明らかではないからである。その代わり、次の性質を示すことができる(問題 [11-2])。

$$\operatorname{Tr}\hat{\rho}^2 \le 1 \tag{11.21}$$

等号は純粋状態のときにのみ成り立つ。したがって、Tr $\hat{\rho}^2$ は純粋度(purity)とよばれる。上限1に近い ほど純粋状態に近いというわけである⁵。この純粋度についての関係が前節(ii)の性質に代わるものとなる。

また、密度演算子の固有値を ρ_n とすると、固有値は全て非負となる。これが密度演算子のもうひとつの重要な性質である。純粋状態の場合、固有値は一つが1で残りは0 であるから確かに非負となっている(性質 (iii))。混合状態の場合、和にあらわれる $|\psi_i\rangle$ が互いに直交すれば p_i が固有値となる。 p_i は確率を表し非負の値をとるからこの場合も成り立っている。直交しないときも示すことができてこれが密度演算子の三つめの性質となる(問題 [11–2])。

以上より純粋状態・混合状態の密度演算子は次の三つの性質を満たす。

(i)
$$\operatorname{Tr} \hat{\rho} = \sum_{n} \rho_{n} = 1$$

(ii') $\operatorname{Tr} \hat{\rho}^{2} = \sum_{n} \rho_{n}^{2} \le 1$ 等号は純粋状態のとき
(iii') $\rho_{n} \ge 0$

 ho_n は密度演算子の固有値を表す。これらの条件は前節で考えた純粋状態の密度演算子の性質の一般化である。(i)は密度演算子であれば当然満たされるべきものであり、(ii')は密度演算子が純粋状態であるか混合 状態であるかを判断する指標となる。(iii')は p_i が非負であることを反映した性質である。

さて、これらの性質は独立に成り立つものだろうか。Hilbert 空間の次元が2の場合に、これらの条件を 表したのが図11.1である。固有値のとりうる範囲は図の太線上にあるが、この領域は(i)、(ii')によっても 指定できるし、(i)、(iii')によっても指定できる。つまり、両者の条件は等価である。ところが、この性質

⁴この場合の固有状態は互いに直交する完全系である。

⁵下限については次節の例や問題を参照。



図 11.1: 2次元 Hilbert 空間の場合の密度演算子の固有値分布。(i)の条件は $\rho_1 + \rho_2 = 1$ 、(ii') は $\rho_1^2 + \rho_2^2 \le 1$ 、(iii') は $\rho_1 \ge 0$ 、 $\rho_2 \ge 0$ とあらわされる。太線上が二つの固有値のとりうる範囲を表す。

が成り立つのは 2 次元の場合のみである。3 次元以上では (i)、(iii') が成り立てば (i)、(ii') が成り立つが、 逆は正しくはない。例えば 3 次元の場合、

$$(\rho_1, \rho_2, \rho_3) = \left(\frac{2}{3}, \frac{2}{3}, -\frac{1}{3}\right)$$
 (11.22)

は (i) と (ii') を満たすが (iii') を満たさない。つまり、密度演算子の条件として課されるのは (i) と (iii') で ある。(i) と (iii') を課せば (ii') は自動的に満たされる。

11.3 応用

11.3.1 Bloch ベクトル

Hilbert 空間の次元が2の最も簡単な量子系を具体的に考えてみよう。この場合の演算子は2×2の行列、 状態は2成分のベクトルで表される。一般に2×2の行列は単位行列 \hat{I}_2 と三つの Pauli 行列 $\hat{\sigma} = (\hat{\sigma}^x, \hat{\sigma}^y, \hat{\sigma}^z)$ を用いて

$$\hat{\rho} = C\left(\hat{I}_2 + \boldsymbol{r} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}\right) = C\left(\begin{array}{cc} 1 + r_3 & r_1 - ir_2\\ r_1 + ir_2 & 1 - r_3 \end{array}\right)$$
(11.23)

と書くことができる。C およびベクトル r は実定数であり、前節の条件 (i)、(iii') を満たす範囲で任意の値 をとる⁶。条件 (i) より

$$C = \frac{1}{2} \tag{11.24}$$

となる。また、固有値は $(1 \pm |\mathbf{r}|)/2$ で与えられるから、 $|\mathbf{r}| \le 1$ でなければならない。極座標表示

$$\boldsymbol{r} = r\boldsymbol{n} = r \begin{pmatrix} \sin\theta\cos\varphi\\ \sin\theta\sin\varphi\\ \cos\theta \end{pmatrix}$$
(11.25)

⁶任意のエルミート行列は実数係数を用いた線形結合で表される。

を用いると、 $0 \le r \le 1$ である。*n* は単位ベクトルを表し、 (θ, φ) は球面を指定するパラメータである $(0 \le \theta \le \pi, 0 \le \varphi < 2\pi)$ 。以上より、2 次元の密度演算子の一般形は

$$\hat{\rho} = \frac{1}{2} \left(\hat{I}_2 + r\boldsymbol{n} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}} \right) = \frac{1}{2} \left(\begin{array}{cc} 1 + r\cos\theta & re^{-i\varphi}\sin\theta \\ re^{i\varphi}\sin\theta & 1 - r\cos\theta \end{array} \right)$$
(11.26)

である。純粋度を計算すると

$$\operatorname{Tr}\hat{\rho}^2 = \frac{1}{2}(1+r^2) \tag{11.27}$$

であるから、r = 1のとき純粋状態、 $0 \le r < 1$ のとき混合状態を表す。

この場合の密度演算子は3次元ベクトルrを用いて表すことができる。単位球の表面または内部の点を指 定することによって密度演算子、すなわち状態を一意的に指定することができる。このベクトルを Bloch ベクトル(Bloch vector)、単位球を Bloch 球(Bloch sphere)、という。Bloch ベクトルが Bloch 球の表 面上を指しているとき純粋状態、内部のとき混合状態をそれぞれ表す。

Bloch ベクトルの意味を調べるために物理量に対応する量を計算してみよう。2次元 Hilbert 空間におけるエルミート演算子は単位行列と三つの Pauli 演算子で尽きている。よってそれらの期待値を計算すればよい。期待値は(11.17)式から計算される。単位行列の期待値は自明に1なので他の三つを計算すると

$$\langle \hat{\sigma}^x \rangle = r \sin \theta \cos \varphi \tag{11.28}$$

$$\langle \hat{\sigma}^y \rangle = r \sin \theta \sin \varphi \tag{11.29}$$

$$\langle \hat{\sigma}^z \rangle = r \cos \theta \tag{11.30}$$

である。つまり、密度演算子は

$$\hat{\rho} = \frac{1}{2} \left(\hat{I} + \langle \hat{\boldsymbol{\sigma}} \rangle \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}} \right)$$
(11.31)

と書ける。全ての演算子の期待値を計算(測定)することではじめて密度演算子を一意的に定めることができる⁷。純粋状態の場合、Blochベクトルは時間発展によって球面上を動きまわる。このような Bloch ベクトルによる状態の表現は量子力学を直観的に理解するときに有用となる⁸。

純粋状態と混合状態の違いを具体的に見るために、次の例を考える。状態を

$$|\psi\rangle = \frac{1}{2}|0\rangle + \frac{\sqrt{3}}{2}|1\rangle \tag{11.32}$$

とする。 $|0\rangle$ および $|1\rangle$ は $\hat{\sigma}^z$ の固有状態であり

$$\hat{\sigma}^z |0\rangle = |0\rangle \tag{11.33}$$

$$\hat{\sigma}^z |1\rangle = -|1\rangle \tag{11.34}$$

とする⁹。純粋状態の密度演算子は

$$\hat{\rho} = \frac{1}{4} |0\rangle \langle 0| + \frac{3}{4} |1\rangle \langle 1| + \frac{\sqrt{3}}{4} |0\rangle \langle 1| + \frac{\sqrt{3}}{4} |1\rangle \langle 0|$$
(11.35)

と書くことができる。これとよく似た混合状態の密度演算子として、(11.14)式で考えたように

$$\hat{\rho} = \frac{1}{4} |0\rangle \langle 0| + \frac{3}{4} |1\rangle \langle 1| \tag{11.36}$$

としてみよう。これらはどちらの演算子に対しても

$$\langle 0|\hat{\rho}|0\rangle = \frac{1}{4} \tag{11.37}$$

$$1|\hat{\rho}|1\rangle = \frac{3}{4} \tag{11.38}$$

⁷有限の Hilbert 空間の系では、全ての演算子の期待値を指定すれば状態は一意的に定まる。問題 [11-4] を参照。

⁸高次元の場合には空間の構造が複雑となりそれほど有用ではない。問題 [11-5] 参照。

⁹状態の表現に0と1を用いるのは後の章で量子計算を扱うからである。今のうちに慣れておくために本章でも用いる。

を与える。つまり、 $\hat{\sigma}^{z}$ に対応する物理量を測定して +1 または -1 をとる確率はどちらの場合においても それぞれ等しい。Bloch ベクトルを計算すると、(11.35) 式のとき

$$\boldsymbol{r} = \left(\frac{\sqrt{3}}{2}, 0, -\frac{1}{2}\right) \tag{11.39}$$

になる。純粋状態であるから単位球面上のベクトルである。一方、(11.36)式のときは

$$\boldsymbol{r} = \left(0, 0, -\frac{1}{2}\right) \tag{11.40}$$

である。球内部の点を表している。両者は ô^x の期待値によって区別される。

r = 0のとき、Bloch ベクトルは0ベクトルであり

$$\hat{\rho} = \frac{1}{2}\hat{I}_2\tag{11.41}$$

となる。これは純粋度が最も小さな値 1/2 をとる状態であり、完全混合状態 (completely mixed state) と よばれる。全ての Pauli 演算子の期待値は 0 である。基底 $|0\rangle$ と $|1\rangle$ を用いると

$$\hat{\rho} = \frac{1}{2} \Big(|0\rangle \langle 0| + |1\rangle \langle 1| \Big)$$
(11.42)

と書くことができる¹⁰。

11.3.2 非対角長距離秩序*

密度演算子の非対角成分が量子力学的な効果を表していることを Bose 粒子多体系において見てみよう。 自由 Bose 粒子では低温で Bose-Einstein 凝縮を起こす。凝縮の様子を調べると、その寄与は密度演算子の 非対角項にあらわれる。

Bose 粒子が N 個ある系の状態を $|\Psi_N\rangle$ とすると純粋状態の密度演算子は

$$\hat{\rho} = |\Psi_N\rangle\langle\Psi_N| \tag{11.43}$$

である。状態の座標表示をとることで波動関数を得ることができる。例えば波動関数の絶対値の2乗は

$$\langle \boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, \dots, \boldsymbol{r}_N | \hat{\rho} | \boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, \dots, \boldsymbol{r}_N \rangle = |\psi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, \dots, \boldsymbol{r}_N)|^2$$
(11.44)

と得られる。次の量を考えてみよう。

$$\frac{1}{N!} \int \mathrm{d}\boldsymbol{r}_2 \cdots \mathrm{d}\boldsymbol{r}_N \, \langle \boldsymbol{r}', \boldsymbol{r}_2, \dots, \boldsymbol{r}_N | \hat{\rho} | \boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}_2, \dots, \boldsymbol{r}_N \rangle \tag{11.45}$$

 r_2 から r_N までの座標変数を積分している。得られる関数は二つの変数r、r'をもつ。これは次のように変形できる。

$$\frac{1}{N!} \int d\boldsymbol{r}_{2} \cdots \boldsymbol{r}_{N} \langle \boldsymbol{r}', \boldsymbol{r}_{2}, \dots, \boldsymbol{r}_{N} | \hat{\rho} | \boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}_{2}, \dots, \boldsymbol{r}_{N} \rangle$$

$$= \frac{1}{N!} \int d\boldsymbol{r}_{2} \cdots \boldsymbol{r}_{N} \langle \Psi_{N} | \boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}_{2}, \dots, \boldsymbol{r}_{N} \rangle \langle \boldsymbol{r}', \boldsymbol{r}_{2}, \dots, \boldsymbol{r}_{N} | \Psi_{N} \rangle \tag{11.46a}$$

$$= \langle \Psi_N | \left(\sum_{N'} \frac{1}{N'!} \int d\boldsymbol{r}_2 \cdots \boldsymbol{r}_{N'} \, \hat{\psi}^{\dagger}(\boldsymbol{r}) | \boldsymbol{r}_2, \dots, \boldsymbol{r}_{N'} \rangle \langle \boldsymbol{r}_2, \dots, \boldsymbol{r}_{N'} | \hat{\psi}(\boldsymbol{r}') \right) | \Psi_N \rangle \quad (11.46b)$$

$$= \frac{1}{N} \langle \Psi_N | \hat{\psi}^{\dagger}(\boldsymbol{r}) \hat{\psi}(\boldsymbol{r}') | \Psi_N \rangle$$
(11.46c)

¹⁰混合状態の密度演算子の分解の仕方は一意的ではない(問題[11-3])。

 $\hat{\psi}(m{r})$ は第8章で導入した場の演算子である。式 (8.29)(104 ページ)の完全性関係を用いて積分を消去している。このようにして次の量を定義できる。

$$\rho(\mathbf{r},\mathbf{r}') = \langle \Psi_N | \hat{\psi}^{\dagger}(\mathbf{r}) \hat{\psi}(\mathbf{r}') | \Psi_N \rangle \tag{11.47}$$

これを1粒子密度行列という。

さて、自由粒子の場合波動関数は平面波で与えられ、場の演算子を Fourier 変換するのが便利である。

$$\hat{\psi}(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\boldsymbol{k}} \hat{a}_{\boldsymbol{k}} \mathrm{e}^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}$$
(11.48)

このとき、1粒子密度行列は

$$\rho(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}') = \frac{1}{V} \sum_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}'} \langle \Psi_N | \hat{a}^{\dagger}_{\boldsymbol{k}} \hat{a}_{\boldsymbol{k}'} | \Psi_N \rangle \mathrm{e}^{i(\boldsymbol{k}'\cdot\boldsymbol{r}'-\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r})}$$
(11.49)

と書くことができる。状態 $|\Psi_N\rangle$ に対して波数 k' をもつ粒子を消して k の粒子を作って元の状態の戻る寄 与を表しているがこれは明らかに k = k' のときのみ有限の値を得る。よって

$$\rho(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}') = \frac{1}{V} \sum_{\boldsymbol{k}} \langle \hat{n}_{\boldsymbol{k}} \rangle \mathrm{e}^{-i\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')}$$
(11.50)

と書ける。 $\hat{n}_{k} = \hat{a}_{k}^{\dagger} \hat{a}_{k}^{\dagger}$ は波数 k の粒子を数える数演算子である。〈〉は $|\Psi_{N}\rangle$ についての期待値を表す。k についての和を k = 0 とそれ以外に分ける。

$$\rho(\mathbf{r},\mathbf{r}') = \frac{\langle \hat{n}_{\mathbf{0}} \rangle}{V} + \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}(\neq \mathbf{0})} \langle \hat{n}_{\mathbf{k}} \rangle \mathrm{e}^{-i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')}$$
(11.51)

第 2 項は $|m{r}-m{r}'| o\infty$ で激しく振動して 0 になると考えられる。よって、 $|m{r}-m{r}'| o\infty$ で 1 粒子密度行 列は

$$\rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \sim \frac{\langle \hat{n}_{\mathbf{0}} \rangle}{V}$$
(11.52)

となる。これはk = 0の状態を占める粒子数密度を表している。Bose-Einstein 凝縮は粒子が1粒子エネル ギーが低い状態を巨視的な数だけ占めている現象である。巨視的なというのは粒子数が体積に比例して大き くなることを意味している。つまり、Bose-Einstein 凝縮を起こしている系では熱力学極限で $\langle \hat{n}_0 \rangle / V$ が有 限の値をとる。そしてそれは1粒子密度行列の非対角成分($r \neq r'$ の成分)にあらわれる。これを非対角長 距離秩序(off-diagonal long-range order)とよぶ。非対角成分に凝縮密度があらわれる点はBose-Einstein 凝縮が量子力学的な現象であることを端的に示しているといえる。

Bose-Einstein 凝縮はもともと自由 Bose 粒子の系で発見されたが、相互作用がある系においても存在することが知られている。その場合、1粒子エネルギーという概念がなくなってしまうので、ある1粒子エネルギーを巨視的な数占有するという描像が通用しなくなる。このようなとき、非対角長距離秩序の概念が有用なものとなる。詳しい説明は省略するが、 $|r - r'| \rightarrow \infty$ で

$$\rho(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}') \sim \Psi(\boldsymbol{r})\Psi^*(\boldsymbol{r}') \tag{11.53}$$

と書くことができて $\Psi(\mathbf{r})$ は巨視的波動関数 (macroscopic wave function) とよばれる。巨視的波動関数 は Bose-Einstein 凝縮を起こす系において秩序変数の役割を果たす¹¹。

¹¹波動関数とは異なるものである。その証拠に、巨視的波動関数は相互作用のある系において Gross–Pitaevskii 方程式あるいは 非線形 Schrödinger 方程式とよばれる方程式を満たす。文字通り非線形の方程式である。

11.4 問題

 $[\mathbf{A}]$

[11-1] 純粋状態の密度演算子

純粋状態の密度演算子 $\hat{\rho} = |\psi\rangle\langle\psi|$ について考える。

(a). 以下の性質を示せ。

- (i) $\operatorname{Tr} \hat{\rho} = 1$
- (ii) $\hat{\rho}^2 = \hat{\rho}$
- (iii) $\hat{\rho}$ の固有値はひとつが1で残りが0

(b). 時間発展状態 $\hat{\rho}(t) = \hat{U}(t)\hat{\rho}\hat{U}^{\dagger}(t) = |\psi(t)\rangle\langle\psi(t)|$ についての von Neumann 方程式 (11.11) が、状態 ベクトル $|\psi(t)\rangle$ に対する Schrödinger 方程式と等価であるかどうか調べよ。

[11-2] 混合状態の密度演算子

混合状態の密度演算子(純粋状態も含む)

$$\hat{\rho} = \sum_{i} p_i |\psi_i\rangle \langle\psi_i| \tag{11-2.1}$$

について考える。 $\{|\psi_i\rangle\}$ は規格化された状態だが互いに直交しない。 $\{p_i\}$ は非負の量であり、 $\sum_i p_i = 1$ を満たす。

(a). 次の式が成り立つことを示せ。

$$\operatorname{Tr} \hat{\rho}^2 \le 1 \tag{11-2.2}$$

また、等号が成り立つのは純粋状態のときのみであることも示せ。

(b). 密度演算子の固有値が非負であることを示せ。

 $[\mathbf{B}]$

[11-3] 密度演算子の性質

(a). 次の密度行列は純粋状態、混合状態のどちらか、あるいはどちらでもないかをそれぞれ調べよ。密度行列の場合、一般形 $\hat{
ho} = \sum_i p_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i|$ に分解せよ。

$$\hat{\rho}_1 = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \tag{11-3.1}$$

$$\hat{\rho}_2 = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 3 & 1\\ 1 & 1 \end{pmatrix}$$
(11-3.2)

$$\hat{\rho}_3 = \begin{pmatrix} \frac{2}{3} & 0 & 0\\ 0 & \frac{1}{6} & \frac{1}{2}\\ 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{6} \end{pmatrix}$$
(11-3.3)

(b). 式 (11.26) でr = 1のとき、対応する状態 $|\psi\rangle$ を求めよ。それはどのような状態か。

(c). 混合状態の密度演算子について、(11.16)式のような分解の仕方は一意的ではない。2準位の系において具体例を挙げよ。

(d). $\hat{\rho}_A$ 、 $\hat{\rho}_B$ を密度演算子としたとき、次の演算子も密度演算子を表していることを示せ。

$$\hat{\rho} = p_{\rm A}\hat{\rho}_{\rm A} + p_{\rm B}\hat{\rho}_{\rm B} \tag{11-3.4}$$

 $p_{\mathrm{A}} \geq 0$ 、 $p_{\mathrm{B}} \geq 0$ 、 $p_{\mathrm{A}} + p_{\mathrm{B}} = 1$ とする。

[11-4] 基底演算子と Bloch ベクトル

N次元 Hilbert 空間における密度演算子を、基底演算子 $\{\hat{X}_{\mu}\}_{\mu=0,1,...,N^2-1}$ を用いて表すことを考える。 これらは次の正規直交関係を満たすエルミート演算子 (行列)である。

$$\frac{1}{N} \operatorname{Tr} \hat{X}_{\mu} \hat{X}_{\nu} = \delta_{\mu,\nu} \quad (\mu = 0, 1, 2, \dots, N^2 - 1)$$
(11-4.1)

 $\hat{X}_0 = \hat{I}_N$ は単位演算子を表す。また、任意のエルミート演算子 \hat{A} は、 \hat{X}_μ の線形結合

$$\hat{A} = \sum_{\mu=0}^{N^2 - 1} a_{\mu} \hat{X}_{\mu} \tag{11-4.2}$$

で書くことができるとする。 a_µ は実定数である。

(a). 任意の演算子 Â、 Â について次の式が成り立つことを示せ。

$$\frac{1}{N} \sum_{\mu=0}^{N^2-1} \operatorname{Tr} \hat{A} \hat{X}_{\mu} \operatorname{Tr} \hat{B} \hat{X}_{\mu} = \operatorname{Tr} \hat{A} \hat{B}$$
(11-4.3)

また、次の表現はどのようになるか。

$$\frac{1}{N} \sum_{\mu=0}^{N^2 - 1} \operatorname{Tr} \hat{A} \hat{X}_{\mu} \hat{B} \hat{X}_{\mu}$$
(11-4.4)

(b). 密度演算子を次のように書いて係数 $\{\lambda_{\mu}\}$ を定義する。

$$\hat{\rho} = \frac{1}{N} \sum_{\mu=0}^{N^2 - 1} \lambda_{\mu} \hat{X}_{\mu} = \frac{1}{N} \left(\lambda_0 \hat{I}_N + \sum_{a=1}^{N^2 - 1} \lambda_a \hat{X}_a \right)$$
(11-4.5)

各係数 λ_{μ} を、期待値 $\langle \hat{X}_{\mu} \rangle$ を用いて表せ。

(c). $N^2 - 1$ 次元の Bloch ベクトル $\lambda = (\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_{N^2-1})$ を定義する。次の式を示せ。

$$\lambda^2 \le N - 1 \tag{11-4.6}$$

(d). 第 5.1 節 ($63 \, \text{ペ-ジ}$)のハミルトニアン (5.1) 式で時間発展する系について、 $|\psi(0)\rangle$ が \hat{S}^z の固有値 $\frac{\hbar}{2}$ の固有状態にあるとする。このとき、適当な基底を用いて密度演算子 $\hat{\rho}(t)$ の行列表示と Bloch ベクトル $\lambda(t)$ を求めよ。

[11-5] Bloch ベクトルの性質

2種類の純粋状態の密度演算子を考える。

$$\hat{\rho}_{\rm A} = |\psi_{\rm A}\rangle\langle\psi_{\rm A}| \tag{11-5.1}$$

$$\hat{\rho}_{\rm B} = |\psi_{\rm B}\rangle\langle\psi_{\rm B}| \tag{11-5.2}$$

(a). 2 つの状態の内積から次の角度 Θ を定義する ([2-10]、[5-7] 参照)。

$$|\langle \psi_{\rm A} | \psi_{\rm B} \rangle|^2 = 1 - \sin^2 \Theta$$
 (11–5.3)

 $0 \le \Theta \le \frac{\pi}{2}$ である。このとき、 $Tr (\hat{\rho}_{A} - \hat{\rho}_{B})^{2}$ を Θ を用いて表せ。

(b). [11–4] の議論を用いて Bloch ベクトル λ_A 、 λ_B を定義する。このとき、ベクトルの内積から次の角度 Φ を定義する。

$$\boldsymbol{\lambda}_{\mathrm{A}} \cdot \boldsymbol{\lambda}_{\mathrm{B}} = |\boldsymbol{\lambda}_{\mathrm{A}}| |\boldsymbol{\lambda}_{\mathrm{B}}| \cos \Phi \tag{11-5.4}$$

⊕ と ⊖ の関係を求めよ。

(c). 次の不等式を示せ。

$$-\frac{1}{N-1} \le \cos \Phi \le 1 \tag{11-5.5}$$

(d). N = 3のとき、(11-4.1) 式を満たす基底演算子 \hat{X}_{μ} を具体的に構成せよ。

(e). N = 3のとき、(c) で下限を達成するときの Bloch ベクトルの組の例を具体的に求めよ。

 $[\mathbf{C}]$

[11-6] 密度演算子間の関係

2次元の系について考える。

(a). 二つの密度演算子 $\hat{\rho}_1$ 、 $\hat{\rho}_2$ に対して次の量を定義する。

$$D(\hat{\rho}_1, \hat{\rho}_2) = \text{Tr} |\hat{\rho}_1 - \hat{\rho}_2|$$
(11-6.1)

密度演算子の適当な表現を用いてこの量を表し、どのようなものか考察せよ。

(b). 次の量を考える。

$$F(\hat{\rho}_1, \hat{\rho}_2) = \text{Tr} |\sqrt{\hat{\rho}_1} \sqrt{\hat{\rho}_2}| = \text{Tr} \sqrt{\sqrt{\hat{\rho}_1} \hat{\rho}_2 \sqrt{\hat{\rho}_1}}$$
(11-6.2)

一般にこの量を扱うのは難しいので、簡単な場合を考える。片方の密度演算子が純粋状態のとき、あるい は二つの密度演算子が同時対角化できるときに、F がどのように表されるかをそれぞれ調べよ。 [11-7] Fermi 粒子系の1粒子密度行列

自由 Fermi 粒子の基底状態について、1 粒子密度行列 (11.47) 式を計算し、非対角長距離秩序を起こさな いことを示せ。

[11-8] Wigner 表示

1次元の系を考える。任意の演算子 \hat{X} に対して次のWigner表示を定義する。

$$X_{\rm W}(q,p) = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}r \,\mathrm{e}^{ipr/\hbar} \langle q - \frac{r}{2} |\hat{X}|q + \frac{r}{2} \rangle \tag{11-8.1}$$

 $|q \pm \frac{r}{2}\rangle$ は座標演算子の固有状態を表す。

- (a). \hat{X} として座標演算子 \hat{x} および運動量演算子 \hat{p} を考えたとき、それぞれの Wigner 表示を求めよ。
- (b). \hat{X} として純粋状態の密度演算子 $\hat{
 ho} = |\psi\rangle\langle\psi|$ を考える。このとき、次の式を示せ。

$$\int \frac{\mathrm{d}p}{2\pi\hbar} \rho_{\mathrm{W}}(q,p) = |\psi(q)|^2 \tag{11-8.2}$$

$$\int \frac{\mathrm{d}q\mathrm{d}p}{2\pi\hbar}\,\rho_{\mathrm{W}}(q,p) = 1\tag{11-8.3}$$

 $\psi(q) = \langle q | \psi \rangle$ は波動関数を表す。また、 $\int \frac{\mathrm{d}q}{2\pi\hbar} \rho_{\mathrm{W}}(q,p)$ がどのようになるか調べよ。

(c). 調和振動子のコヒーレント状態を $|\phi_{\alpha}(t)\rangle$ とする。このとき、 $\hat{\rho}(t) = |\phi_{\alpha}(t)\rangle\langle\phi_{\alpha}(t)|$ の Wigner 表示を求めよ。

[11-9] 密度演算子の古典近似

(a). 演算子 $\hat{X} \geq \hat{Y}$ の Wigner 表示をそれぞれ $X_W(q,p)$ 、 $Y_W(q,p)$ とする。Tr $\hat{X}\hat{Y}$ を $X_W(q,p)$ 、 $Y_W(q,p)$ を用いて表せ。

(b). 次の式を示せ。

$$(XY)_{W}(q,p) = X_{W}(q,p) * Y_{W}(q,p)$$
(11-9.1)

左辺は演算子 $\hat{X}\hat{Y}$ の Wigner 表示を表す。右辺の積は次のように定義される。

$$f(q,p) * g(q,p) = f(q,p) \exp\left[\frac{i\hbar}{2} \left(\stackrel{\leftarrow}{\partial}_{q} \stackrel{\rightarrow}{\partial}_{p} - \stackrel{\leftarrow}{\partial}_{p} \stackrel{\rightarrow}{\partial}_{q}\right)\right] g(q,p)$$
(11–9.2)

微分は矢印の方向にある関数に作用する。この積は、Moyal 積あるいはスター積とよばれる。

(c). 密度演算子 $\hat{\rho}(t)$ は von Neumann 方程式 (11.11) に従う。方程式の Wigner 表示を求めよ。また、 $\hbar \rightarrow 0$ の極限で方程式がどのようになるか調べよ。

第12章 量子もつれとBellの不等式

本章では量子力学の本質とは何かを考察する。量子もつれの概念とその記述方法を議論した後、量子性の 本質を捉えた Bell の不等式を導く。これらの考察は古典論と量子論の決定的な違いを明らかにしてくれる。

12.1 量子もつれ

12.1.1 合成系の記述

これまで量子力学のさまざまな性質を見てきたが、量子力学の最大の特徴とは何だろうか。そのひとつ として重ねあわせの原理がさまざまな効果をもたらしていることは疑いようがない。演算子の非可換性や 同種粒子の非識別性は、さまざまな状態の重ねあわせを生じさせる。いずれの場合の量子効果も重ねあわ せの原理があってはじめてもたらされるものである。前章で扱ったような

$$\psi\rangle = a|0\rangle + b|1\rangle \tag{12.1}$$

という状態は、二つの固有状態 |0> と |1> を一つの状態の中に同時に出現させる。古典系ではこのようなこ とはありえない。古典的にも二つの状態がまざった系を考えることはできるが、前章の密度演算子による 記述で見たように明確な違いがある。そして次章で見るように、量子計算機が古典計算機よりも早くなる (と期待されている)要因も重ねあわせの状態を考えることにある。

重ねあわせの効果は多自由度・多体系を考えるときに顕著になる。例えば、相互作用しない同種 2 粒子系の波動関数は、(7.22)式(93ページ)のように波動関数の積の和で表される。また、二つのスピンの合成を考えると、合成スピンの z成分 \hat{S}^{z} の固有値が 0 となる固有状態は(7.49)、(7.51)式(96ページ)のように積の和で書かれる。多自由度系を解くときの標準的な手法は変数分離を行うことである。つまり、波動関数をそれぞれの自由度の波動関数の積で表す。ところがそのような変数分離された解では全ての解を表現することができないのは上の例を記述することができないことから明らかである。平均場近似(Hartree Hartree Fock 近似)は波動関数を各変数の関数の積とおくことで解をみつける方法であるが、それでは全ての解を表現できないから、変数分離された条件の下で最適解を見つけてもそれは一般に真の解ではない¹。

多自由度・多体系において変数分離できるときとできないときの決定的な違いは何であろうか?例えば (7.51)式(96ページ)の合成スピンが0の状態を考えてみよう。

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \Big(|0\rangle_1 |1\rangle_2 - |1\rangle_1 |0\rangle_2\Big) \tag{12.2}$$

これは一つめのスピンが状態0にあるとき二つめのスピンは状態1、前者が1のとき後者は0というよう に、二つのスピン間に相関がある状態である。二つの積で書けていればこのような相関はないことに注意 してほしい。例えば、合成スピンの固有状態ではないが、

$$|\psi'\rangle = \frac{1}{2} \Big(|0\rangle_1 |0\rangle_2 + |0\rangle_1 |1\rangle_2 + |1\rangle_1 |0\rangle_2 + |1\rangle_1 |1\rangle_2 \Big)$$
(12.3)

という状態は上記の $|\psi\rangle$ より複雑に見えるが、

$$|\psi'\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \Big(|0\rangle_1 + |1\rangle_1\Big) \Big(|0\rangle_2 + |1\rangle_2\Big)$$
(12.4)

¹完全系ではあるので変数分離解の線形結合で任意の状態を表すことができる。

と積に分解できる。この場合、二つのスピン間に相関は無い。それぞれのスピンがとる状態の確率は独立 に決まる²。

式 (12.2) のように合成系の状態が積に分解できないとき、量子もつれ、あるいはエンタングルメントが あるという。量子もつれのある状態は、上で述べた通りこれまでの解析においても登場してきたものであ る。本章の目的は、これが量子性を特徴づけるもっとも非自明な指標であることを理解することである。

合成系の表現

今さらだが、合成系の記述についてまとめておこう。多自由度の系を記述する際、例えば波動関数はそ れぞれの変数の波動関数の積で書かれる。状態ベクトルで書くときも同様である。そのときの基本的な考 え方や注意点をまとめる³。

系1と2を合成した系を扱う。簡単のため、系1と2の状態がそれぞれ2次元であるとする。スピン1/2 のような系である。このとき、部分系1における状態の一般形は

$$|\psi_1\rangle_1 = a_1|0\rangle_1 + b_1|1\rangle_1 \tag{12.5}$$

と書ける。独立な状態の数は2であり、それぞれの状態は例えば

$$\hat{\sigma}_1^z |0\rangle_1 = |0\rangle_1 \tag{12.6}$$

$$\hat{\sigma}_1^z |1\rangle_1 = -|1\rangle_1 \tag{12.7}$$

のようにある演算子 分着の固有状態にとることができる。部分系2の状態についても同様にして

$$|\psi_2\rangle_2 = a_2|0\rangle_2 + b_2|1\rangle_2 \tag{12.8}$$

と書ける。このような二つの独立な系の合成を考えてみる。全体の状態を各状態ベクトルの直積で表す。

$$|\psi\rangle = |\psi_1\rangle_1 \otimes |\psi_2\rangle_2 \tag{12.9}$$

直積は積のようなものだが、かけあわせるものは状態ベクトルであるので単純な積ではない。内積とも異 なる。直積の様子は具体的に状態を縦ベクトルで表示してみるとわかる。例えば、

$$|0\rangle_1 = \left(\begin{array}{c}1\\0\end{array}\right)_1 \tag{12.10}$$

$$|1\rangle_1 = \begin{pmatrix} 0\\1 \end{pmatrix}_1 \tag{12.11}$$

という表現を考える。自由度2についても同様である。このとき、

$$|\psi_1\rangle_1 \otimes |\psi_2\rangle_2 = \begin{pmatrix} a_1 \\ b_1 \end{pmatrix}_1 \otimes \begin{pmatrix} a_2 \\ b_2 \end{pmatrix}_2$$
(12.12)

である。通常の積と異なることがわかるだろう。

合成系の Hilbert 空間の次元は各次元の積になるので今の場合 $2 \times 2 = 4$ となる。つまり、このときの状態ベクトルは 4 成分の縦ベクトルで書かれる。例えば、(12.9) 式の状態は次のように書ける。

$$|\psi\rangle = a_1 a_2 |0\rangle_1 \otimes |0\rangle_2 + a_1 b_2 |0\rangle_1 \otimes |1\rangle_2 + b_1 a_2 |1\rangle_1 \otimes |0\rangle_2 + b_1 b_2 |1\rangle_1 \otimes |1\rangle_2 = \begin{pmatrix} a_1 a_2 \\ a_1 b_2 \\ b_1 a_2 \\ b_1 b_2 \end{pmatrix}$$
(12.13)

²問題 [1–4] で類似の計算を行った。

³直積の意味をよく理解していればとばしてもよい。

これは次のようにベクトルをベクトルの中に埋め込むことによって理解できる。

$$\begin{pmatrix} a_1 \\ b_1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} a_2 \\ b_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_1 \times \begin{pmatrix} a_2 \\ b_2 \end{pmatrix} \\ b_1 \times \begin{pmatrix} a_2 \\ b_2 \end{pmatrix} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_1 a_2 \\ a_1 b_2 \\ b_1 a_2 \\ b_1 b_2 \end{pmatrix}$$
(12.14)

これが直積の具体的な表現(の一例)である。縦ベクトルを用いた表現は、ブラケットを用いた表現と違っ て特定の表現になっていることに注意してほしい。ここでは4つの基底を00、01、10、11の順に並べてい るが、そのようにする必然性は全くない。順番を入れかえて書いてもよい。それはつまり、状態を縦ベク トルで表すときにはどの基底を用いているのかを明記しておかなければならないことを意味している。今 考えている系の場合、00、01、10、11以外にも00、10、01、11 や00、11、01、10、さらには合成スピン の固有状態の基底を用いることもある。

状態に作用する演算子も同様にして表現することができる。合成系の空間に作用する演算子は部分系1 に作用する演算子と2に作用する演算子に分解できる。

$$\hat{X} = \hat{X}_1 \otimes \hat{X}_2 \tag{12.15}$$

例えば、合成スピンの演算子 $\hat{S} = \hat{S}_1 + \hat{S}_2$ を考えてみよう。これまでにもこのような表現を用いてきたが、 $\hat{S}_1 \ge \hat{S}_2$ が作用する Hilbert 空間は異なる。正確には次のように書くべきである。

$$\hat{\boldsymbol{S}} = \hat{\boldsymbol{S}}_1 \otimes \hat{\boldsymbol{I}}_N + \hat{\boldsymbol{I}}_N \otimes \hat{\boldsymbol{S}}_2 \tag{12.16}$$

 \hat{I}_N は N 次元の単位演算子を表す。各スピンの次元を N とした。例えば、この演算子を直積状態 (12.9) 式 に作用させると

$$\hat{\boldsymbol{S}}|\psi\rangle = \hat{\boldsymbol{S}}_1|\psi_1\rangle_1 \otimes |\psi_2\rangle_2 + |\psi_1\rangle_1 \otimes \hat{\boldsymbol{S}}_2|\psi_2\rangle_2$$
(12.17)

と書ける。演算子は作用する空間が異なる状態をすりぬける。

多くの場合、⊗や単位演算子は省略してしまう。省略しても意味することが明らかなことが多いからで ある。以下でも基本的には省略した表記を用いることにする。

12.1.2 特異値分解

2 粒子の状態が二つの状態ベクトルの直積に分解できないとき量子もつれがあるということを前節で述べた。分解できるかどうかは簡単な場合にはすぐにわかるが、一般にそうとは限らない。2 次元の系でも 例えば (12.3) 式のような状態が分解できるかは即座に判断しにくい。ここでは合成系の状態が与えられた ときに分解できるかどうかの一般的な判断条件を考える。

系の次元がそれぞれ N₁、N₂ である二つの合成系の一般形

$$|\psi\rangle = \sum_{\mu=1}^{N_1} \sum_{\nu=1}^{N_2} a_{\mu\nu} |\mu\rangle_1 |\nu\rangle_2$$
 (12.18)

を考える。 $N_1 \ge N_2$ とする。状態ベクトルはそれぞれの空間における正規直交基底を表し次元の数だけある。 $a_{\mu\nu}$ は複素数を表す。この状態が積の形に分解できるときの $\{a_{\mu\nu}\}$ に対する条件を求めるのが目的である。

係数 $a_{\mu\nu}$ を要素としてもつ行列 \hat{A} を考える。

$$(\hat{A})_{\mu\nu} = a_{\mu\nu} \tag{12.19}$$

これは $N_1 \times N_2$ の長方行列である。状態を分割できるかどうかは行列を次のように分解することによって 調べることができる。

$$\hat{A} = \hat{U}\hat{\Lambda}\hat{V}^{\dagger} \tag{12.20}$$

 \hat{U} は $N_1 \times N_1$ のユニタリー行列、 \hat{V} は $N_2 \times N_2$ のユニタリー行列、 $\hat{\Lambda}$ は $N_1 \times N_2$ の行列で、 $(1,1), (2,2), \ldots, (N_2, N_2)$ 成分に非負の値をもつ⁴。他の成分は全て 0 である。このような分解を特異値分解 (singular value decomposition)または Schmidt 分解 (Schmidt decomposition)とよぶ。

特異値分解を示そう。準備として行列Âを次のように表しておく。

$$\hat{A} = \begin{pmatrix} \hat{A}_1 \\ \hat{A}_2 \end{pmatrix} \tag{12.21}$$

 \hat{A}_1 は $N_2 imes N_2$ 、 \hat{A}_2 は $(N_1 - N_2) imes N_2$ の行列を表す。また、 $\hat{\Lambda}$ も同様にして

$$\hat{\Lambda} = \begin{pmatrix} \hat{\Lambda}_1 \\ 0 \end{pmatrix}$$
(12.22)

とおく。 $\hat{\Lambda}_1$ は $N_2 \times N_2$ の対角行列を表す。対角成分は非負の値をもつ。 $\hat{\Lambda}$ の下の部分は $(N_1 - N_2) \times N_2$ の行列で全ての成分が0である。

行列 \hat{A} は正方行列ではないので扱いづらいのだが、行列の積 $\hat{A}^{\dagger}\hat{A}$ は $N_2 \times N_2$ の正方行列であり、エルミートでもある。よって次のように分解できる。

$$\hat{A}^{\dagger}\hat{A} = \hat{V}\hat{\Lambda}_{1}^{2}\hat{V}^{\dagger} \tag{12.23}$$

 \hat{V} は $N_2 imes N_2$ のユニタリー行列を表す。 $\hat{A}^{\dagger}\hat{A}$ の固有値は非負であるので固有値を $\hat{\Lambda}_1^2$ と書くことができる。 これが(12.22)式にあらわれる $\hat{\Lambda}_1$ になる。

 $\hat{\Lambda}_1$ の対角成分が全て正であるとしよう。このとき、次の行列を考える。

$$\hat{U} = \begin{pmatrix} \hat{A}_1 \hat{V} \hat{\Lambda}_1^{-1} & \hat{U}_{12} \\ \hat{A}_2 \hat{V} \hat{\Lambda}_1^{-1} & \hat{U}_2 \end{pmatrix}$$
(12.24)

 $\hat{A}_1 \hat{V} \hat{\Lambda}_1^{-1} \mathsf{t} N_2 \times N_2, \ \hat{A}_2 \hat{V} \hat{\Lambda}_1^{-1} \mathsf{t} (N_1 - N_2) \times N_2$ の行列である。 $\hat{U}_{12} \mathsf{t} N_2 \times (N_1 - N_2), \ \hat{U}_{12} \mathsf{t} (N_1 - N_2) \times (N_1 - N_2) \otimes (N_1 - N_2)$ の行列で具体的な形はまだ指定されていない。このとき、

$$\hat{U}\hat{\Lambda}\hat{V}^{\dagger} = \begin{pmatrix} \hat{A}_1\hat{V}\hat{\Lambda}_1^{-1} & \hat{U}_{12} \\ \hat{A}_2\hat{V}\hat{\Lambda}_1^{-1} & \hat{U}_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{\Lambda}_1 \\ 0 \end{pmatrix} \hat{V}^{\dagger} = \begin{pmatrix} \hat{A}_1 \\ \hat{A}_2 \end{pmatrix}$$
(12.25)

であるから、 \hat{U}_{12} と \hat{U}_2 の具体的な形に関係なく答えの形を求めることができた。あとは \hat{U} がユニタリー 行列となるように \hat{U}_{12} と \hat{U}_2 を決めればよい。次の条件から決まる。

$$\hat{U}_{12}^{\dagger}\hat{A}_1 + \hat{U}_2^{\dagger}\hat{A}_2 = 0 \tag{12.26}$$

$$\hat{U}_{12}^{\dagger}\hat{U}_{12} + \hat{U}_{2}^{\dagger}\hat{U}_{2} = 1 \tag{12.27}$$

 \hat{U} をユニタリー行列にすることができるのは行列 $\hat{A}\hat{A}^\dagger$ からも理解できる。これは $N_1 imes N_1$ のエルミート 行列であるから

$$\hat{A}\hat{A}^{\dagger} = \hat{U}\hat{\Lambda}^2\hat{U}^{\dagger} \tag{12.28}$$

と書けるはずである。

以上より特異値分解を理解することができる。 $\hat{\Lambda}_1$ の対角成分に0が含まれているときは(12.24)式で逆行列を考えることができない。その場合の証明は課題として残しておこう(問題[12-3])。

特異値分解ができればユニタリー行列 \hat{U} と \hat{V} を用いてそれぞれの空間における基底変換ができる。つまり

$$|\tilde{\mu}\rangle_1 = \sum_{\mu'=1}^{N_1} (\hat{U}^{\mathrm{T}})_{\mu\mu'} |\mu'\rangle_1$$
(12.29)

$$|\tilde{\nu}\rangle_2 = \sum_{\nu'=1}^{N_2} (\hat{V}^{\dagger})_{\nu\nu'} |\nu'\rangle_2 \tag{12.30}$$

 ${}^4N_1 \ge N_2$ としていることに注意。

$$|\psi\rangle = \sum_{\mu=1}^{N_2} \lambda_{\mu} |\tilde{\mu}\rangle_1 |\tilde{\mu}\rangle_2 \tag{12.31}$$

と書くことができる。非負の量 λ_{μ} は $\hat{\Lambda}_1$ の対角成分を表し、特異値 (singular value) とよばれる。このように書けば量子もつれがあるかどうかが明らかである。 λ_{μ} が 2 成分以上で正になれば量子もつれがあると言える⁵。

特異値分解は一意的ではない。ユニタリー行列 $\hat{U} \geq \hat{V}$ の選び方には任意性がある。一方で特異値には任 意性がない。並べ方の任意性はあるが、どのような特異値の組があるかは元の行列を与えれば決まるもの であり、それが量子もつれの性質を決定する。

12.1.3 縮約密度演算子とエンタングルメントエントロピー

量子もつれのある状態の性質をとらえるために、2粒子の複合系において1粒子の状態のみを観測する ことを考える。もう一方の粒子の状態については観測しない。2粒子間に相関があれば観測しない状態の 影響があらわれると考えられるが、それはどのように表されるかを調べるのである

系全体の状態は純粋状態の密度演算子を用いて表される。前節で与えられた状態 $|\psi
angle$ を用いて

$$\hat{\rho} = |\psi\rangle\langle\psi| \tag{12.32}$$

と書ける。粒子1の状態に作用する物理量 X₁を測定する。その期待値は

$$\langle \hat{X}_1 \rangle = \operatorname{Tr} \hat{\rho} \hat{X}_1 \tag{12.33}$$

と書ける。トレースは1の基底と2の基底それぞれについて和をとることで行われる。

$$\langle \hat{X}_1 \rangle = \sum_{\mu_1} \sum_{\mu_2} {}_1 \langle \mu_1 |_2 \langle \mu_2 | \hat{\rho} \hat{X}_1 | \mu_1 \rangle_1 | \mu_2 \rangle_2 = \operatorname{Tr}_1 \operatorname{Tr}_2 \hat{\rho} \hat{X}_1$$
(12.34)

最右辺のトレースはそれぞれの自由度についての和を表す。それぞれについて独立に和をとるので

$$\langle \hat{X}_1 \rangle = \operatorname{Tr}_1 \hat{\rho}_1 \hat{X}_1 \tag{12.35}$$

$$\hat{\rho}_1 = \operatorname{Tr}_2 \hat{\rho} \tag{12.36}$$

と書くことができる。 $\hat{\rho}_1$ は部分系 1 の状態空間に作用する演算子である。この表現は、粒子 1 の状態を 調べる限り、全体の密度演算子 $\hat{\rho}$ の代わりに粒子 2 についてトレースをとった縮約密度演算子 (reduced density operator) $\hat{\rho}_1$ を用いれば十分であることを示している。見ない部分は "trace out" してしまおうと いうことである。

縮約密度演算子の性質を調べてみよう。任意の状態は

$$|\psi\rangle = \sum_{\mu} \lambda_{\mu} |\mu\rangle_1 |\mu\rangle_2 \tag{12.37}$$

のように表すことができるのは前節で見た通りである。このとき縮約密度演算子を計算すると

$$\hat{\rho}_1 = \sum_{\mu} \lambda_{\mu}^2 |\mu\rangle_1 \langle \mu| \tag{12.38}$$

となる。これは密度演算子の標準形をしているので密度演算子であることは間違いない。量子もつれがな い系では純粋状態であるが、ある系では混合状態になる。全系では純粋状態であったものが部分系を調べ

 $^{^5}$ 正の特異値の数を Schmidt ランク (Schmidt rank) という。つまり、量子もつれがない条件は Schmidt ランクが 1 である。

ると混合状態に見える。これは2粒子間に相関があること、つまり量子もつれがあることによってもたら される性質である。

どの程度量子もつれがあるかどうかは、縮約密度演算子に対して純粋度を計算すればわかるが、von Neumann エントロピー (von Neumann entropy)を計算してもよい。

$$S = -\mathrm{Tr}_1 \hat{\rho}_1 \ln \hat{\rho}_1 \tag{12.39}$$

von Neumann エントロピーは密度演算子(確率分布)が与えられることによってこの式のように定義される。縮約密度演算子から計算される von Neumann エントロピーはエンタングルメントエントロピー (entanglement entropy)とよばれる。文字通り量子もつれの度合いを測る量となる。例えば、量子もつれ がなかったら λ_{μ} はひとつのみが 1 なのでエントロピーは最小値 S = 0 となる。最大値は問題 [12–1] とし て残しておく。

純粋状態の系でも部分系を観測することによって混合状態に見えるということは、逆のことも意味している。つまり、混合状態でもそれを部分系として含むような系を考えることによって純粋状態にすることができる。これは系に冗長な自由度を付与することによって行われる。このような操作を純粋化(purification)という。

12.2 EPR パラドックスと Bell の不等式

12.2.1 EPR パラドックス

前節で量子もつれがある状態が特異な状態であることを述べた。例としてスピン0の合成状態

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \Big(|0\rangle_1 |1\rangle_2 - |1\rangle_1 |0\rangle_2\Big) \tag{12.40}$$

を考える。この状態では、一方のスピンの状態を測定するともう一方のスピンも一意的に決まる。これは、 二つのスピンが十分離れているとしてそのような測定を行ったとき、一方での測定がもう一方のスピンに 瞬時に伝わることを意味している⁶。

果たしてこれは驚くべきことなのだろうか?一方の状態を測ったとき、もう一方の状態が決まる例は次 のような混合状態を考えても得られる。

$$\hat{\rho} = \frac{1}{2} |0\rangle_1 |1\rangle_{21} \langle 0|_2 \langle 1| + \frac{1}{2} |1\rangle_1 |0\rangle_{21} \langle 1|_2 \langle 0|$$
(12.41)

この状態は (12.40) 式から得られる純粋状態とは異なる。違いを調べるために、 $|\psi\rangle$ において次のような基底変換を行ってみよう。

$$|+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \Big(|0\rangle + |1\rangle\Big) \tag{12.42}$$

$$|-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \Big(|0\rangle - |1\rangle \Big) \tag{12.43}$$

 $|0\rangle$ 、 $|1\rangle$ が $\hat{\sigma}^{z}$ の固有状態であるとしたとき、 $|+\rangle$ 、 $|-\rangle$ は $\hat{\sigma}^{x}$ の固有状態となる。このとき、(12.40)式は

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(-|+\rangle_1| - \rangle_2 + |-\rangle_1| + \rangle_2 \right) \tag{12.44}$$

と書ける。つまり、σ^zの代わりに σ^xを測ったとしても同様の相関が得られる。さらに一般化を行って任意の方向のスピン演算子の固有状態基底を考えて同様の相関を得ることもできる(問題 [12-4])。このように、どの向きのスピンを測定するかは一切決めていないにも関わらず、一方の測定を行うことでもう一方の状態が決まる。これは (12.41) 式の混合状態では考えられないことである。

⁶この表現では、スピンがどの空間座標の領域に分布しているかを表す状態ベクトルの部分が省略されている。直積としてそのような成分を考える必要がある。

ここで挙げたスピンの系と類似の例を用いて量子力学の記述が不完全であることを主張したのが第1章 でふれた EPR パラドックスである。つまるところ、Einstein らが考えた物理学とは、全ての物理量が全て の時間で一意的に決まっておりそれらの値を知ることが測定するという、ごく自然な仮定を元にしている。 これは実在論という言葉で表現される。量子力学がそのような仮定と異なるということはこれまでに見て きた通りである。ただし、それは見かけのものであり何か見落としてきたものを修正すれば実在論の範疇 で全ての現象を記述できるはずだと考えるのは自然な期待である。不完全な量子力学の理論を修正すれば 問題を解決できるのだろうか。

12.2.2 Bellの不等式

1964 年、Bell は古典論、正確には局所実在論(local objective theory)の範囲では、ある相関を調べた ときに満たすべき不等式があることを見つけた。局所実在論とは、局所性・実在性を仮定した理論である。 古典力学を想定してもらえればよいが、詳細は問わないので既存の理論である必要はない。局所性とはあ る事象が光より速く異なる点に伝わることはないこと、実在性は全ての物理量は観測によらず常に定まっ た値をとっているとすることである。

相関を量子力学に基づいて調べてみると、不等式が成り立たない場合があることが示される。これは量 子力学をどのように修正しても局所実在論の範囲で「量子現象」を記述できないことを意味している。そ のため、非常に簡単な式ではあるが、古典論の限界および量子力学の特異性を示した最も重要な関係であ ると考えられている。

ある点で2粒子の系を生成し、それらを逆方向に飛ばすことを考える。地点Aでは粒子1を観測し、同時刻に離れた地点Bで粒子2を観測する。そしてそれらの値についての相関を調べる。ここでは2通りの値をとるスピンを考える。したがって、それぞれの地点で例えば σ^z を測定したとき、測定値は+1あるいは-1となる。得られる値は量子力学では一般に確率的になるが、上述したように古典力学でもそのようなことは起こりうる。ただし、その確率は状態が固有にもっている性質ではなく実験の都合で何かのパラメータがランダムに選ばれていると考える。つまり、隠れた変数(hidden variable)が存在すると考える。そのように考えると古典系でも確率的に扱うことが可能になる。

2スピンの複合系を考え、部分系 1 について $\hat{Q} = \mathbf{q} \cdot \hat{\sigma}_1$ 、 $\hat{R} = \mathbf{r} \cdot \hat{\sigma}_1$ 、部分系 2 について $\hat{S} = \mathbf{s} \cdot \hat{\sigma}_2$ 、 $\hat{T} = \mathbf{t} \cdot \hat{\sigma}_2$ という量を測定する。 \mathbf{q} 、 \mathbf{r} 、 \mathbf{s} 、 \mathbf{t} はそれぞれ c 数の単位ベクトルを表しており、測定するスピンの向きを示す。そして次の相関量を測定する。

$$\langle \hat{Q}\hat{S} + \hat{R}\hat{S} + \hat{R}\hat{T} - \hat{Q}\hat{T} \rangle \tag{12.45}$$

古典系でも測定される量は測定の度にばらつく。1点で2粒子を放出するときに装置の原因により特定の 状態を選択する可能性がある。このようにして量子力学とは関係なくばらついた値をとる可能性を考えて 古典系(局所実在論)でも測定値を説明できるかどうかを探るのである。

局所実在論に基づくと、それぞれの量は確率によって決まるためさまざまな値をとるが、ひとつのサンプ ルでは確定した値をもっている。ひとつのサンプルの値を*Q、R、S、T*とすると、次の不等式が成り立つ。

$$|QS + RS + RT - QT| = |(Q + R)S + (R - Q)T|$$
(12.46a)

$$\leq |Q+R||S| + |R-Q||T|$$
 (12.46b)

$$\leq |Q+R| + |R-Q|$$
 (12.46c)

三角不等式および $|S| \le 1$ 、 $|T| \le 1$ を用いている。Q、Rの組みあわせを考えると、(12.46c) 式の量は最大値 2 をとることがわかる。したがって、平均をとって次の関係が成り立つ。

$$\langle \hat{Q}\hat{S} + \hat{R}\hat{S} + \hat{R}\hat{T} - \hat{Q}\hat{T} \rangle \le 2 \tag{12.47}$$

これが Bell の不等式 (Bell inequality)を表す⁷。数学的に導かれる不等式の関係であるが、等式が成り立つ場合も実際に考えることができる。これが局所実在論により導かれる測定値のとりうる範囲である。

⁷正確にはこの式は CHSH 不等式 (CHSH inequality) とよばれる。Bell の示した式を一般化した不等式であり、1969 年、 Clauser、Horne、Shimony、Holt により示された。

同じ相関平均量を量子論を用いて考えてみよう。次の変形を行う。

$$(\hat{Q}\hat{S} + \hat{R}\hat{S} + \hat{R}\hat{T} - \hat{Q}\hat{T})^2 = 4\hat{I}_4 + [\hat{Q}, \hat{R}][\hat{S}, \hat{T}]$$
(12.48)

第2項の交換関係を計算すると

$$[\hat{Q}, \hat{R}] = [\boldsymbol{q} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}, \boldsymbol{r} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}] = 2i(\boldsymbol{q} \times \boldsymbol{r}) \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}$$
(12.49)

である。 $q \times r$ は最大値 1 をとるベクトルであるから、 $[\hat{Q}, \hat{R}]$ の固有値は最大で 2 となる。 $[\hat{S}, \hat{T}]$ も同様で ある。量子系の場合、平均は状態 $|\psi\rangle$ についての期待値を表す。次の関係が導かれる。

$$\langle \psi | \hat{Q}\hat{S} + \hat{R}\hat{S} + \hat{R}\hat{T} - \hat{Q}\hat{T} | \psi \rangle^2 \le \langle \psi | (\hat{Q}\hat{S} + \hat{R}\hat{S} + \hat{R}\hat{T} - \hat{Q}\hat{T})^2 | \psi \rangle \le 8$$
(12.50)

つまり

$$\langle \psi | \hat{Q}\hat{S} + \hat{R}\hat{S} + \hat{R}\hat{T} - \hat{Q}\hat{T} | \psi \rangle \le 2\sqrt{2}$$
 (12.51)

を得る。Bell の不等式とは異なる上限を得る。この上限 $2\sqrt{2}$ は Tsirelson (Cirel'son)限界 (Tsirelson (Cirel'son) bound) とよばれる。

この上限をとるのはどのようなときかを考えてみよう。状態が積に分解できるとする。

$$|\psi\rangle = |\psi_1\rangle_1 |\psi_2\rangle_2 \tag{12.52}$$

つまり量子もつれが無い状態である。このとき、

$$\langle \hat{Q}\hat{S} + \hat{R}\hat{S} + \hat{R}\hat{T} - \hat{Q}\hat{T} \rangle = \langle \hat{Q} + \hat{R} \rangle \langle \hat{S} \rangle + \langle \hat{R} - \hat{Q} \rangle \langle \hat{T} \rangle$$
(12.53)

であるが、各量のとりうる値を考えると最大値は2となる。この結果はBellの不等式と一致する。二つの 量の積の平均を平均の積に分解できることが局所実在論と同じ結果を導くということがわかる。とすると、 量子もつれがあるときにBellの不等式の上限を越えると予想される。式 (12.40)の状態の場合に計算をし てみると、4 つの単位ベクトルの向きを適切に選べば上限の値2√2をとれることがわかる(問題 [12-2])。

このように、量子もつれのある状態は量子性をもっとも顕著に捉えた状態であることがわかる。Bellの 不等式の破れは、1981年と1982年にAspectらによって実験的に確認されている。

12.3 問題

$[\mathbf{A}]$

[12-1] 部分系の状態

2 粒子の複合系を考える。純粋状態の密度演算子 $\hat{
ho} = |\psi\rangle\langle\psi|$ に対して、縮約密度演算子 $\hat{
ho}_1 = \operatorname{Tr}_2 \hat{
ho}$ を考える。

(a). 例として、スピン 1/2 を合成した系の状態を考える。合成角運動量の固有状態について、縮約密度 演算子 $\hat{\rho}_1$ をそれぞれ求めよ。 $\hat{\rho}_1$ が混合状態となるのはどのようなときか。

(b). 一般に、純粋度 Tr₁ $\hat{\rho}_1^2$ およびエンタングルメントエントロピー $S_1 = -\text{Tr}_1 \hat{\rho}_1 \ln \hat{\rho}_1$ の、とりうる最 大値と最小値をそれぞれ求めよ。各部分系の次元を N とする。

(c). 同様にして、部分系 2 の縮約密度演算子 $\hat{\rho}_2 = \text{Tr}_1 \hat{\rho}$ を考える。(b) で計算した量を考えたとき、 $\hat{\rho}_1$ の場合のものと比較してどうなるか。 $\hat{\rho}_1$ と $\hat{\rho}_2$ の次元が同じときと異なるときでは違いがあるか。

[12-2] Bell の不等式の破れ

式 (12.45) の量に対して、量子論の場合の不等式 (12.51) を考える。状態 $|\psi\rangle$ が (12.40) 式で与えられると き、Tsirelson 限界 $2\sqrt{2}$ を得るためにはベクトル q、r、s、t をどのようにとればよいか。具体例を挙げよ。

[12-3] 特異値分解

特異値分解 (12.20) 式について、 $\hat{\Lambda}$ ($\hat{\Lambda}_1$)の対角成分が0を含むときの場合に証明を行え。

$[\mathbf{B}]$

[12-4] 量子もつれと相関

(a). 次の状態を考える。

$$|\psi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \Big(|0\rangle_1 |1\rangle_2 - |1\rangle_1 |0\rangle_2 \Big)$$
 (12-4.1)

 $n \cdot \sigma_1$ を測定した後、 $n \cdot \sigma_2$ を測定する。nは任意の単位ベクトルを表す。前者が +1 (-1) であったとき、後者は -1 (+1) となることを示せ。

(b). 次の状態を考える。

$$|\psi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \Big(|0\rangle_1 |1\rangle_2 + |1\rangle_1 |0\rangle_2 \Big)$$
 (12-4.2)

 $n \cdot \sigma_1$ を測定すると +1 が得られた。このとき系 2 の状態はどのようになっているか。

[12-5] 複合系の分解

(a). 次の行列の特異値分解をそれぞれ求めよ。

$$\hat{A}_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1\\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$
(12-5.1)

$$\hat{A}_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 0\\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$
(12-5.2)

$$\hat{A}_3 = \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$$
(12-5.3)

(b). 次の状態が量子もつれをもつかどうか調べよ。もたない場合、具体的に状態を直積で表せ。もつ場合、特異値分解を用いて基底変換を行い、最小の和で表せ。

$$|\psi_{1}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \Big(|0\rangle_{1}|0\rangle_{2} + |1\rangle_{1}|1\rangle_{2} \Big)$$
(12-5.4)

$$|\psi_{2}\rangle = \frac{1}{2} \Big(|0\rangle_{1}|0\rangle_{2} + |0\rangle_{1}|1\rangle_{2} + |1\rangle_{1}|0\rangle_{2} + |1\rangle_{1}|1\rangle_{2} \Big)$$
(12-5.5)

$$|\psi_{3}\rangle = \frac{1}{\sqrt{10}} \Big(|0\rangle_{1}|0\rangle_{2} - 2|0\rangle_{1}|1\rangle_{2} + |1\rangle_{1}|0\rangle_{2} + 2|1\rangle_{1}|1\rangle_{2} \Big)$$
(12-5.6)

(c). 2次元の系を3つ合成した系を2種類考える。

$$|\psi_4\rangle = \frac{1}{2\sqrt{5}} \Big(2|000\rangle + 2|100\rangle - 2|010\rangle + |001\rangle - |011\rangle + |101\rangle - 2|110\rangle - |111\rangle \Big) \quad (12-5.7)$$

$$|\psi_5\rangle = \frac{1}{2\sqrt{5}} \Big(2|000\rangle + 2|100\rangle + |010\rangle + 2|001\rangle - |011\rangle + 2|101\rangle + |110\rangle - |111\rangle \Big) \quad (12-5.8)$$

 $|000\rangle = |0\rangle_1 |0\rangle_2 |0\rangle_3$ などとした。これらの状態を系1(2次元)と系2・3(4次元)の合成系とみなす。特異値分解を行うときの特異値を2つの状態それぞれについて求めよ。同様のことを、系2と系3・1の合成系、系3と系1・2の合成系についてそれぞれ行え。それらの結果から3つの合成系の分解ができるかどうか調べよ。

[12-6] 2 スピンの系

[10-4] で扱った2種類のスピンからなる次の状態を考える。

$$|\psi(N)\rangle = C_N \left(\hat{a}_1^{\dagger}\hat{b}_2^{\dagger} - \hat{b}_1^{\dagger}\hat{a}_2^{\dagger}\right)^N |0\rangle$$
(12-6.1)

 C_N は規格化定数を表す。縮約密度演算子 $\hat{
ho}_1$ を求め、純粋度および von Neumann エントロピーを計算せよ。

 $[\mathbf{C}]$

[12-7] 2 状態の量子もつれ

2 次元の状態

$$|\psi_1\rangle = a|0\rangle + b|1\rangle \tag{12-7.1}$$

に対して時間反転状態 $| ilde{\psi}_1
angle$ は次のように定義される。

$$|\tilde{\psi}_1\rangle = -i\hat{\sigma}^y |\psi_1^*\rangle = -b^*|0\rangle + a^*|1\rangle \tag{12-7.2}$$

 2×2 の複合系において、状態 $|\psi\rangle$ と時間反転状態 $|\tilde{\psi}\rangle$ との内積を考える。

$$C = \langle \tilde{\psi} | \psi \rangle \tag{12-7.3}$$

この量を用いて $\hat{\rho} = |\psi\rangle\langle\psi|$ のエンタングルメントエントロピーを表せ。また、その結果を用いて量子もつ れがないとき C = 0、最大のとき C = 1 であることを示せ。

第13章 量子計算

量子力学の原理を利用した量子計算の仕組みについて考える。近年量子計算機の研究がさかんになって いるが、前章で議論したような古典では表せない性質を積極的に用いることによって古典計算機の性能を 越える量子計算機をつくることができると期待されている。ここではその計算機の仕組みの例である量子 回路の模型を扱う¹。応用として典型的な例である量子テレポーテーションのアルゴリズムを紹介する。

13.1 量子回路

量子状態は |0〉と |1〉の重ねあわせのように複数の状態をまとめてひとつとして扱うことができる。古典の論理演算でも 0 または 1 (真または偽)の状態、古典ビット (classical bit)を用いて計算を行うが、一度にひとつの値しか用いることができない。とすると量子状態を用いることで効率のよい計算が可能になることが期待される。 |0〉と |1〉は量子ビット (qubit)とよばれている。量子状態がいかに効率的かは直積状態を考えることでわかる。例えば

$$|\psi_i\rangle = a_i|0\rangle_i + b_i|1\rangle_i \qquad i = 1,2 \tag{13.1}$$

という状態を考えると、

$$|\psi_1\rangle_1|\psi_2\rangle_2 = a_1a_2|0\rangle_1|0\rangle_2 + a_1b_2|0\rangle_1|1\rangle_2 + b_1a_2|1\rangle_1|0\rangle_2 + b_1b_2|1\rangle_1|1\rangle_2$$
(13.2)

というように4種類の状態の重ねあわせとなる。N個の系では2^Nにもなる。多体系の問題のひとつはこのように自由度が莫大になることにあるが、ここではそのことを逆に活用するわけである。

量子ビットとユニタリー演算

古典ビットの問題は入力したビットに対して論理演算を行い出力を得る。論理演算はNOT、OR、AND、 XOR などからなり、これらの演算を複数組みあわせてほしい計算を実現する。

量子の場合にも同様の問題を考えることができる。入力として状態 |ψ〉を考えて演算をくりかえし、最後に異なる状態 |ψ'〉を得、測定を行って答えを得る。演算とはどのようなものだろうか。状態の大きさが 変わらないようにするにはユニタリー演算、つまりユニタリー演算子をかければよい。通常の時間発展と 同じである。

2準位の系ではエルミート演算子は単位演算子と三つの Pauli 演算子しかないのでこれらの演算子を組み あわせた計算を考える。例えば

$$|\psi\rangle = a|0\rangle + b|1\rangle \tag{13.3}$$

に $\hat{\sigma}^x$ を作用させると

$$|\psi'\rangle = \hat{\sigma}^x |\psi\rangle = a|1\rangle + b|0\rangle \tag{13.4}$$

¹東工大生であればご存知であると思うが、近年 子アニーリングの計算機が実際につくられて計算が行われている。本章ではこの原理については扱わない。ただし、量子ビットを用いることは以下の議論と同じであるし、基本原理は本講義で既に扱った断熱近 似や横磁場 Ising 模型を元にしているので理解することは簡単である。



図 13.1: 量子回路の例。左の状態が初期状態、X と書かれている四角が量子ゲートを表し、右側で測定を 行う。測定を表す右の四角と2本線は省略されることもある。

のように量子ビットが入れかわる。同様に $\hat{\sigma}^z$ は

$$|\psi'\rangle = \hat{\sigma}^z |\psi\rangle = a|0\rangle - b|1\rangle \tag{13.5}$$

のように $|1\rangle$ の符号を変えるし、 $\hat{\sigma}^{y}$ は

$$|\psi'\rangle = \hat{\sigma}^{y}|\psi\rangle = i\Big(a|1\rangle - b|0\rangle\Big) \tag{13.6}$$

のように全体の係数を除けば $\hat{\sigma}^x \geq \hat{\sigma}^z$ を続けて作用させた結果を導く²。このような演算を図に表したものが 図 13.1 である。状態は左から右へと変化していく。演算を行う部分を量子ゲート(quantum gate)とよぶ。 2 準位系の場合、量子ゲートは NOT ゲート(NOT gate)、位相ゲート(phase shift gate)、Hadamard ゲート(Hadamard gate)を用いることが多い³。それぞれ次のように表される⁴。

$$\hat{X} = |0\rangle\langle 1| + |1\rangle\langle 0| \tag{13.7}$$

$$\hat{\Theta}(\theta) = |0\rangle\langle 0| + e^{i\theta} |1\rangle\langle 1|$$
(13.8)

$$\hat{H} = \frac{1}{\sqrt{2}} \Big(|0\rangle\langle 0| + |0\rangle\langle 1| + |1\rangle\langle 0| - |1\rangle\langle 1| \Big)$$
(13.9)

それぞれのゲートは Pauli 演算子を用いて表すことができるし逆も可能であるからこれらのゲートを用いて任意の状態を実現できる。 \hat{X} は $\hat{\sigma}^x$ と等価である。他の Pauli 演算も \hat{Y} あるいは \hat{Z} のように表すこともある。特に、Hadamard 変換を考えると初期状態 $|0\rangle$ に対して

$$\hat{H}|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \Big(|0\rangle + |1\rangle\Big) \tag{13.10}$$

のように重ねあわせの状態を実現できる。この演算の最も簡単な応用は乱数の生成である。得られた状態 は |0> と |1> の重ねあわせであり、それぞれの実現確率は 1/2 となる。よって得られた状態を測定すること によって、ランダムな 2 値を発生させることができる。

量子もつれの生成

量子性の特徴を活かすには 2 ビット以上の複合系を考える必要がある。図 13.2 のように 2 本の線を引く ことで 2 ビットの系を表すことができる。初期状態として直積状態 $|\psi_1\rangle_1|\psi_2\rangle_2$ を用いたとき、演算を各ビッ トで独立に行うと得られる状態はやはり直積状態である。量子力学ならではのもつれのある状態を作り出 すには両ビットに作用する演算を考えればよい。典型的なゲートとして CNOT ゲート (CNOT gate) が 知られている⁵。次のように書かれる。

$$\hat{C} = |0\rangle_1 \langle 0|\hat{I}_2 + |1\rangle_1 \langle 1|\hat{X}_2 \tag{13.11}$$

図 13.2 のように表される。これは系1の状態に応じて系2の状態を変化させる演算を表す。系1を制御 ビット、系2をターゲットビットとよぶ。制御ビットの状態が0であればターゲットビットは変化させず、

 $^{{}^{2}\}hat{\sigma}^{y}=-i\hat{\sigma}^{z}\hat{\sigma}^{x}$ であるから当然である。

³Hadamard は「あだまーる」と読む。Hadamard はフランスの数学者である。

 $^{{}^4\}hat{H}$ はハミルトニアンではない。量子計算においてハミルトニアンは出てこないので混同することはないだろう。

⁵CNOT は制御 NOT (Controlled NOT)の略である。



図 13.2: CNOT ゲート。上が制御ビット、下がターゲットビットである。状態の A、B はそれぞれ 0 また は 1 の 2 進数を表す。

制御ビットが1であればターゲットビットの状態を NOT ゲートで変化させる。4 通りの状態はそれぞれ次のようになる。

$$\hat{C}|0\rangle_1|0\rangle_2 = |0\rangle_1|0\rangle_2 \tag{13.12}$$

$$\hat{C}|0\rangle_1|1\rangle_2 = |0\rangle_1|1\rangle_2 \tag{13.13}$$

$$\hat{C}|1\rangle_1|0\rangle_2 = |1\rangle_1|1\rangle_2 \tag{13.14}$$

$$\hat{C}|1\rangle_1|1\rangle_2 = |1\rangle_1|0\rangle_2 \tag{13.15}$$

また、

$$|\psi\rangle = (a|0\rangle_1 + b|1\rangle_1)|0\rangle_2 \tag{13.16}$$

に対しては

$$\hat{C}|\psi\rangle = a|0\rangle_1|0\rangle_2 + b|1\rangle_1|1\rangle_2 \tag{13.17}$$

である。*ab* ≠ 0 であれば量子もつれのある状態である。元の初期状態は直積で書かれているから量子もつ れがないことに注意してほしい。このように量子ゲートを用いて量子もつれがある状態を構成することが できる。

量子ゲートを組み合わせて状態を変化させる模型を量子回路(quantum circuit)とよぶ。量子計算機は 量子回路を実現させることによってつくることができる。量子ビットはスピンである必要はなく超伝導量 子ビットなどさまざまなものが考えられている。

13.2 量子テレポーテーション

応用として量子テレポーテーション(quantum teleportation)の例を扱おう。量子もつれの性質を利用して離れた点に量子状態を送るアルゴリズムである。1993年にBennett、Brassard、Crepeau、Jozsa、Peres、Woottersによって提案された⁶。3つの合成系を考えるわけであるが、そのうち最初の2つの状態をAliceが、最後の1つの状態をBobがもっている。量子計算ではAliceとBobが頻繁に登場する。Aliceが情報をBobに送る。2と3の状態間に量子もつれを介在させることによって、「瞬間的な通信」が可能となる。その意味するところを調べるのが主な目的である。

3 粒子 2×2×2 次元の系を考える。目的は Alice がもっている次の状態を Bob に伝えることである。

$$|\psi\rangle = a|0\rangle_1 + b|1\rangle_1 \tag{13.18}$$

これを系1とする。量子的な相関によって状態を伝えることを考えるため、Alice と Bob が量子もつれを もった状態を共有しているとしよう。それらを系2と系3とする。ここでは

$$|B\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \Big(|0\rangle_2 |1\rangle_3 - |1\rangle_2 |0\rangle_3 \Big)$$
(13.19)

⁶研究経緯が数理科学(サイエンス社)2009年2月号のコラムに描写されている。



図 13.3: 量子テレポーテーションの回路図。上二つの量子ビットを Alice、下のビットを Bob がもっている。Bob は測定後の情報を元にユニタリー変換を行い状態 |ψ⟩ を得る。

とする 7 。系 2 を Alice が、系 3 を Bob がもっている。そして全体の状態を $|\psi\rangle$ と $|B\rangle$ の直積状態

$$\Psi\rangle = |\psi\rangle|\mathbf{B}\rangle\tag{13.20}$$

とする。これが初期状態となる。

Alice は \hat{C}_{12} と \hat{H}_1 の演算を行ったあと、状態を測定する。演算を行うと

$$\hat{C}_{12}|\Psi\rangle = \frac{a}{\sqrt{2}} \left(|001\rangle - |010\rangle\right) + \frac{b}{\sqrt{2}} \left(|111\rangle - |100\rangle\right)$$
(13.21)

$$\hat{H}_{1}\hat{C}_{12}|\Psi\rangle = \frac{a}{2}\Big(|001\rangle + |101\rangle - (|010\rangle + |110\rangle)\Big) + \frac{b}{2}\Big(|011\rangle - |111\rangle - (|000\rangle - |100\rangle)\Big)(13.22a)$$

$$= |00\rangle \frac{1}{2}\Big(-b|0\rangle + a|1\rangle\Big) + |01\rangle \frac{1}{2}\Big(-a|0\rangle + b|1\rangle\Big)$$

$$+ |10\rangle \frac{1}{2}\Big(b|0\rangle + a|1\rangle\Big) + |11\rangle \frac{1}{2}\Big(-a|0\rangle - b|1\rangle\Big)$$
(13.22b)

となる。ここで $|\mu\nu\lambda\rangle = |\mu\rangle_1 |\nu\rangle_2 |\lambda\rangle_3$ などの記法を用いた。Alice が状態を測定すると得られた結果に応じて Bob の状態は 4 つあるうちのどれかに決まる。例えば Alice が $|00\rangle$ を測定したら Bob のもとにある状態は $-b|0\rangle + a|1\rangle$ となる。状態の収縮が起こったわけである。これは量子力学にのっとった結果でありそのような演算や測定を行うことができれば実現できるアルゴリズムである。問題は情報が瞬時に伝わったように見えることである。この結果は情報が光速を超えて伝わってはいけないという因果律に反しているのだろうか?

注意するべき点は Alice がどの状態を得たか Bob が知る手段がないことである。Alice は Bob に古典的 な通信(電話や電子メール)を用いて結果を伝える。Bob はその瞬間手元にある状態が何であるかをはじ めて知ることができる⁸。その結果を用いて Alice がもっていた最初の状態 $|\psi\rangle$ がわかる。このように、古 典的な通信を行わないとほしい状態が何であるかわからないため、因果律には反していない。

これは EPR のパラドックスで考えられた思考実験にもあてはまる。系1の状態がわかった瞬間、離れた 場所にある系2の状態も定まるが、系2は手元にある状態が何であるか直ちにはわからない。超光速で状 態は伝わるが、情報は伝わっていないのである。

 $^{^7}$ この状態はしば $^{-7}$ しば Bell 状態 (Bell state) とよばれる。 $|x
angle_1|y
angle_2\pm|y
angle_1|x
angle_2$ のような状態を一般にそうよぶ。

⁸測定を行うと状態は変化してしまうし、1回の測定では状態を特定することができない。状態をたくさんコピーして測定を行うこともできない(問題 [13-6])。

13.3 問題

 $[\mathbf{A}]$

[13-1] 量子テレポーテーション(1)

式 (13.19) の代わりに次の状態をそれぞれ用いたとき、量子テレポーテーションの結果はどうなるか調べよ。

$$|B\rangle = \begin{cases} |0\rangle_{2}|0\rangle_{3} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle_{2}|1\rangle_{3} + |1\rangle_{2}|0\rangle_{3} \\ |1\rangle_{2}|1\rangle_{3} \end{cases}$$
(13-1.1)

[13-2] 量子テレポーテーション (2)

式 (13.22)の結果について、古典通信によって Bob は 4 通りの状態を得る。それぞれの状態について、 元の状態 (13.18)式を構成するためのゲート (図 13.3 の \hat{U})を構成せよ。

$[\mathbf{B}]$

[13-3] 量子ビットと量子ゲート

(a). 2次元系の状態|0) に対して Hadamard ゲートと位相ゲートを用いて次の状態をつくれ。

$$|\psi\rangle = |0\rangle \cos\frac{\theta}{2} + |1\rangle e^{i\varphi} \sin\frac{\theta}{2} = \begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2} \\ e^{i\varphi} \sin\frac{\theta}{2} \end{pmatrix}$$
(13-3.1)

2 種類のゲートは任意の順番で何回用いてもよいが、他の操作を用いることはできない。位相ゲート $\hat{\Theta}(\theta)$ の位相 θ は任意の値を用いることができる。また、全体の位相の違いは無視してよい。

(b). 初期状態 $|0\rangle_1|0\rangle_2$ について、Hadamard ゲート、位相ゲート、CNOT ゲートを用いて以下の状態を それぞれつくれ。

$$|\psi_1\rangle = |1\rangle_1|1\rangle_2 \tag{13-3.2}$$

$$|\psi_{2}\rangle = \frac{1}{2} \Big(|0\rangle_{1}|0\rangle_{2} + |0\rangle_{1}|1\rangle_{2} + |1\rangle_{1}|0\rangle_{2} + |1\rangle_{1}|1\rangle_{2} \Big)$$
(13-3.3)

$$|\psi_{3}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \Big(|0\rangle_{1}|1\rangle_{2} - |1\rangle_{1}|0\rangle_{2} \Big)$$
 (13-3.4)

[13-4] 量子もつれとユニタリー変換

(a). 2 粒子の 2 × 2 次元系を考える。お互いに独立な量子もつれをもった状態(Bell 状態)を全て書き 下せ。

(b). (a) の状態は、Hadamard ゲートと位相ゲートのみを用いてお互いに移り変われることを示せ。定 数倍の違いは無視してよい。

(c). 2×2次元の系において、CNOTゲートによって量子もつれの有無はどのように変化しうるか調べよ。



図 13.4: 状態を交換する交換ゲート。x、yは0または1の状態、Uは CNOT ゲートからなるユニタリー ゲートを表す。

(d). 3 粒子 2 × 2 × 2 次元系を考える。Hadamard ゲートと位相ゲートのみを用いて次の量子もつれを もった状態がお互いに移り変われるかどうかを調べよ。

$$|\psi_{1}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \Big(|0\rangle_{1}|0\rangle_{2}|0\rangle_{3} + |1\rangle_{1}|1\rangle_{2}|1\rangle_{3} \Big)$$
(13-4.1)

$$|\psi_{2}\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} \Big(|1\rangle_{1}|0\rangle_{2}|0\rangle_{3} + |0\rangle_{1}|1\rangle_{2}|0\rangle_{3} + |0\rangle_{1}|0\rangle_{2}|1\rangle_{3} \Big)$$
(13-4.2)

 $[\mathbf{C}]$

[13-5] 状態のいれかえ

図 13.4 のように二つの状態をいれかえるような量子ゲートを求めよ。量子ゲートは CNOT ゲートを用 いよ。何個設置してもよい。

[13-6] 状態のコピー

任意の状態 $|\psi\rangle$ について

$$\hat{U}|\psi\rangle_1|0\rangle_2 = |\psi\rangle_1|\psi\rangle_2 \tag{13-6.1}$$

となるようなユニタリー演算子 \hat{U} が存在しないことを示せ。ユニタリー演算子は $|\psi\rangle$ によらないもので ある。これは、系 1 の状態を系 2 にコピーすることができないことを意味しており、クローン禁止定理 (No-cloning theorem) とよばれる。

第14章 量子測定

本講義の最後に、量子測定の問題を扱う。量子力学は、これまでに議論してきたとおり現象を精密に記述・予言することができる体系である。ところが、測定という過程についてはほとんど何も考えてこなかった。測定によって状態は収縮するという射影原理は理想的な測定であり、実際には誤差の問題がつきまとう。本章では間接測定の模型に基づいて不確定性関係の表現について議論を行う。

14.1 間接測定

14.1.1 間接測定の模型

第1章では射影仮設について述べた。状態は物理量の測定にともなって、その固有状態に収縮する。

$$|\psi\rangle \to \frac{P_n |\psi\rangle}{\sqrt{\langle\psi|\hat{P}_n|\psi\rangle}}, \qquad \hat{P}_n = |n\rangle\langle n|$$
(14.1)

これは射影測定 (projection measurement) ともよばれる。

実際の測定では、系を直接操作するとは限らない。例えば、系に光を入射させて放射される光の変化を 見るといったように、間接的であることの方がふつうである。そこで、ここでは図 14.1 のような間接測定 の模型を考察しよう。これは射影測定も内包する量子測定一般の基本的な枠組みである。

系の状態 $|\psi\rangle$ について測定を行うことを考える。測定装置も量子力学的に扱わなければならない。装置 はプローブ (probe) とよばれることが多いが、その状態を $|\Phi\rangle$ とする。系全体の状態は直積状態

$$|\Psi\rangle = |\psi\rangle \otimes |\Phi\rangle \tag{14.2}$$

で表される。これが初期状態とよぶべきものとなる。密度演算子で表すと

$$\hat{\rho} = |\Psi\rangle\langle\Psi| = |\psi\rangle\langle\psi| \otimes |\Phi\rangle\langle\Phi| \tag{14.3}$$

である。

プローブは系と相互作用を行う。これをユニタリー時間発展としてとらえると、密度演算子は次のよう に変化する。

$$\hat{\rho}' = \hat{U} |\Psi\rangle \langle \Psi | \hat{U}^{\dagger} \tag{14.4}$$

系の状態は次の縮約密度演算子を用いて表される。

$$\hat{\rho}_{\rm s}' = \operatorname{Tr}_{\rm p} \hat{\rho}' \tag{14.5}$$

 Tr_{p} はプローブの自由度についてのトレースを表している。これが元の系の密度演算子 $\hat{\rho}_{s} = |\psi\rangle\langle\psi|$ からどれくらい変化したかを見ることでプローブの及ぼす影響がわかる。トレースの定義にしたがってプローブの基底 $|n\rangle_{p}$ について期待値の和をとる。

$$\hat{\rho}_{\rm s}' = \sum_{n} {}_{\rm p} \langle n | \hat{U} | \Psi \rangle \langle \Psi | \hat{U}^{\dagger} | n \rangle_{\rm p}$$
(14.6a)

$$= \sum_{n} {}_{\mathbf{p}} \langle n | \hat{U}(\hat{\rho}_{\mathbf{s}} \otimes | \Phi \rangle \langle \Phi |) \hat{U}^{\dagger} | n \rangle_{\mathbf{p}}$$
(14.6b)

$$= \sum_{n} {}_{\mathbf{p}} \langle n | \hat{U} | \Phi \rangle \hat{\rho}_{\mathbf{s}} \langle \Phi | \hat{U}^{\dagger} | n \rangle_{\mathbf{p}}$$
(14.6c)



図 14.1: 間接測定の模型。

つまり、縮約密度演算子は

$$\hat{\rho}_{\rm s}' = \sum_n \hat{M}_n \hat{\rho}_{\rm s} \hat{M}_n^{\dagger} \tag{14.7}$$

と書くことができる。 \hat{M}_n は次のように定義される演算子で、Kraus 演算子 (Kraus operator) あるいは 測定演算子 (measurement operator) とよばれる。

$$\hat{M}_n = {}_{\mathbf{p}} \langle n | \hat{U} | \Phi \rangle \tag{14.8}$$

縮約密度演算子は

$$\hat{\rho}_{\rm s}' = \sum_{n} \hat{M}_{n} |\psi\rangle \langle\psi|\hat{M}_{n}^{\dagger} \tag{14.9}$$

と書くことができる。つまり、プローブの状態が $|n\rangle_p$ にあったとき、系の状態は射影原理により

$$\frac{\hat{M}_n|\psi\rangle}{\sqrt{p_n}} = \frac{\hat{M}_n|\psi\rangle}{\sqrt{\langle\psi|\hat{M}_n^{\dagger}\hat{M}_n|\psi\rangle}}$$
(14.10)

と変化する。

Kraus 演算子は定義より次の関係を満たす。

$$\sum_{n} \hat{M}_{n}^{\dagger} \hat{M}_{n} = \sum_{n} \langle \Phi | \hat{U}^{\dagger} | n \rangle_{\rm p} \langle n | \hat{U} | \Phi \rangle = \hat{I}_{\rm s}$$
(14.11)

 $\hat{I}_{
m s}$ は系の状態空間における単位演算子である。また、 ${
m Kraus}$ 演算子を用いて次の演算子を定義する。

$$\hat{E}_n = \hat{M}_n^{\dagger} \hat{M}_n \tag{14.12}$$

この期待値を考えると

$$p_n = \operatorname{Tr}_{\mathbf{s}} \hat{E}_n \hat{\rho}_{\mathbf{s}} = \langle \psi | \hat{E}_n | \psi \rangle \tag{14.13}$$

と書ける。

$$p_n = \sum_{m} {}_{\mathbf{s}} \langle m |_{\mathbf{p}} \langle n | \hat{U} | \Psi \rangle \langle \Psi | \hat{U}^{\dagger} | m \rangle_{\mathbf{s}} | n \rangle_{\mathbf{p}}$$
(14.14)

であるから、プローブの状態が $|n\rangle_p$ にある確率を表している。 \hat{E}_n は POVM (Positive operator-valued measure) とよばれる。POVM は系に作用する演算子であることに注意してほしい。名前の通り、非負の 固有値をもつ演算子である。

系とプローブの間の相互作用を表すユニタリー演算子は、両者に相関をもたらす。もしユニタリー変換が

$$\hat{U} = \hat{U}_{\rm s} \otimes \hat{U}_{\rm p} \tag{14.15}$$

と分離できるものであれば、相関は生じず Kraus 演算子は

$$\hat{M}_n = {}_{\mathbf{p}} \langle n | \hat{U}_{\mathbf{p}} | \Phi \rangle \hat{U}_{\mathbf{s}}$$
(14.16)

縮約密度演算子は

$$\hat{\rho}_{\rm s}' = \hat{U}_{\rm s} |\psi\rangle \langle\psi|\hat{U}_{\rm s}^{\dagger} \tag{14.17}$$

と書けてしまう。 $\hat{\rho}'_{s}$ にプローブの影響は入っていない。当然の結果であるが、両者の系に相関を生じさせないとプローブの測定から系の情報を引き出すことができないのである。

理想的な測定であれば、プローブの測定から系の物理量を正確に知ることができるし、系はプローブとの相互作用によって乱されない¹。このようなとき、考えている測定課程は系の射影測定になるはずである。 つまり、 \hat{M}_n は系の状態をプローブの量子数 n に対応した固有状態に変化させる射影演算子となる。実際には \hat{M}_n は射影演算子とは限らないし、 \hat{M}_n でなく \hat{E}_n が射影演算子になることもある。そのような例を次の節で調べることでそれらの意味を探ろう。

14.1.2 例

系とプローブの状態がそれぞれ
$$|0
angle$$
 と $|1
angle$ で書ける $2 imes 2$ 次元系を考える。系の状態は一般に

$$|\psi\rangle = a|0\rangle_{\rm s} + b|1\rangle_{\rm s} \tag{14.18}$$

と書ける。プローブの状態は $|0\rangle_{p}$ としておく。この設定の元でいくつかの \hat{U} を考えてみる。

射影測定

$$\hat{U}|0\rangle_{\rm s}|0\rangle_{\rm p} = |0\rangle_{\rm s}|0\rangle_{\rm p} \tag{14.19}$$

$$\hat{U}|1\rangle_{\rm s}|0\rangle_{\rm p} = |1\rangle_{\rm s}|1\rangle_{\rm p} \tag{14.20}$$

とする。つまり、系の状態が |0> であればプローブの状態はそのまま、 |1> であればプローブの状態を変化 させる。系の状態を反映してプローブが変化するので、系の状態を適切に知ることができる。一方、系の 状態はプローブの作用によって変化しない。したがって、これは系の状態を乱さない理想的な測定である。 簡単な計算の結果、次の Kraus 演算子と POVM を得る。

$$\hat{M}_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \qquad \hat{M}_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$
(14.21)

$$\hat{E}_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \qquad \hat{E}_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$
 (14.22)

両者とも射影演算子を表している。実際、それぞれのプローブ状態をとる確率は

$$p_0 = \text{Tr}\,\hat{E}_0\hat{\rho}_{\rm s} = |a|^2 \tag{14.23}$$

$$p_1 = \text{Tr}\,\hat{E}_1\hat{\rho}_{\rm s} = |b|^2 \tag{14.24}$$

と計算され、対応する系の状態の確率と一致する。系の初期状態を密度演算子で書くと

$$\hat{\rho}_{\rm s} = \begin{pmatrix} |a|^2 & ab^* \\ ba^* & |b|^2 \end{pmatrix}$$
(14.25)

であるが、系との相互作用によって

$$\hat{\rho}_{\rm s}' = \begin{pmatrix} |a|^2 & 0\\ 0 & |b|^2 \end{pmatrix}$$
(14.26)

と変化する。射影測定によって非対角項が消えていることがわかる。

1射影測定なので固有状態への収縮は起こる。以下の例参照。

次の例では、Kraus 演算子は射影演算子にならないが、POVM が射影演算子になる。

$$\hat{U}|0\rangle_{\rm s}|0\rangle_{\rm p} = |0\rangle_{\rm s}|0\rangle_{\rm p} \tag{14.27}$$

$$\hat{U}|1\rangle_{\rm s}|0\rangle_{\rm p} = |0\rangle_{\rm s}|1\rangle_{\rm p} \tag{14.28}$$

系の状態に応じてプローブは適切な反応を示すが、プローブの作用によって系の状態は |0> に変化してし まう。

この場合の計算は省略する。演習問題として上の例と同じ量を計算してほしい(問題[14-1])。

誤差のある測定

次の場合を考える。

$$\hat{U}|0\rangle_{\rm s}|0\rangle_{\rm p} = |0\rangle_{\rm s} \left(\sqrt{1-\epsilon}|0\rangle_{\rm p} + \sqrt{\epsilon}|1\rangle_{\rm p}\right) \tag{14.29}$$

$$\hat{U}|1\rangle_{\rm s}|0\rangle_{\rm p} = |1\rangle_{\rm s} \left(\sqrt{\epsilon}|0\rangle_{\rm p} + \sqrt{1-\epsilon}|1\rangle_{\rm p}\right) \tag{14.30}$$

 ϵ は $0 \le \epsilon \le 1$ の量を表す。すなわち、確率 ϵ でプローブが誤った測定を行ってしまう。 $\epsilon = 0$ のとき、最初の射影測定の例に帰着する。また、 $\epsilon = 1$ のときも $|0\rangle$ と $|1\rangle$ の役割が変わるだけなので射影測定になる。 $\epsilon = 1/2$ のときは系の状態によらずにプローブは同じ変化をするから測定として用をなさないはずである。 各種の量は次のように計算される。

$$\hat{M}_0 = \begin{pmatrix} \sqrt{1-\epsilon} & 0\\ 0 & \sqrt{\epsilon} \end{pmatrix}, \qquad \hat{M}_1 = \begin{pmatrix} \sqrt{\epsilon} & 0\\ 0 & \sqrt{1-\epsilon} \end{pmatrix}$$
(14.31)

$$\hat{E}_0 = \begin{pmatrix} 1 - \epsilon & 0 \\ 0 & \epsilon \end{pmatrix}, \qquad \hat{E}_1 = \begin{pmatrix} \epsilon & 0 \\ 0 & 1 - \epsilon \end{pmatrix}$$
(14.32)

$$p_0 = \text{Tr}\,\hat{E}_0\hat{\rho}_s = (1-\epsilon)|a|^2 + \epsilon|b|^2 \tag{14.33}$$

$$p_1 = \text{Tr}\,\hat{E}_1\hat{\rho}_s = \epsilon |a|^2 + (1-\epsilon)|b|^2 \tag{14.34}$$

$$\hat{\rho}'_{\rm s} = \begin{pmatrix} |a|^2 & 2\sqrt{\epsilon(1-\epsilon)}ab^* \\ 2\sqrt{\epsilon(1-\epsilon)}ba^* & |b|^2 \end{pmatrix}$$
(14.35)

 $\epsilon = 0$ および $\epsilon = 1$ のときは射影測定となる。 $\epsilon = 1/2$ のとき、 $p_0 = p_1 = 1/2$ 、 $\hat{\rho}'_s = \hat{\rho}_s$ である。つまり、測定によって何の情報も得られないが、系は測定によって影響を受けない。

14.2 不確定性関係

本講義のしめくくりとして不確定性関係を考える。不確定性関係は量子力学を学ぶ際にまず持ち出され る性質であり、原理とも言われるように量子力学を象徴するものである。ところが、その意味するところ は比較的あいまいであり、正しい議論がなされていなかった。これは無理もないことで、Heisenberg によ る定義に議論の余地があり近年まできちんとした定式化がなされていなかったのである。本節では、前節 で議論した間接測定の模型を用いて不確定性関係がどのように表されるか議論を行う。

14.2.1 Kennard-Robertsonの不等式

二つの演算子 \hat{A} と \hat{B} があったとき、状態 $|\psi
angle$ についての分散を

$$\sigma(A) = \sqrt{\langle \psi | \hat{A}^2 | \psi \rangle - \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle^2} = \sqrt{\langle \psi | (\hat{A} - \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle)^2 | \psi \rangle}$$
(14.36)

と定義する。 $\sigma(B)$ も同様である。このとき、

$$\sigma(A)\sigma(B) \ge \frac{1}{2} |\langle \psi | [\hat{A}, \hat{B}] | \psi \rangle| \tag{14.37}$$

が成り立つ(問題 [1–1])。これを Kennard–Robertson の不等式 (Kennard–Robertson inequality)という。

この不等式に基づいて第1章でも述べた関係

$$\sigma(x)\sigma(p) \ge \frac{\hbar}{2} \tag{14.38}$$

が導かれる。測定によって状態が乱されてしまうということを考慮すると、この式の解釈は次のようになる。たくさんの同じ状態 $|\psi\rangle$ を用意してそれぞれ $x \ge p$ を測定する。ひとつの系に対して測定するのはどちらかひとつを 1 回のみである。測定を多数回くりかえすと、 $x \ge p$ の値がそれぞれ多数得られる。それらのデータから $\sigma(x)\sigma(p)$ を計算すると、 $\hbar/2$ より大きい値を得る。

Heisenbergの考察とは違って、Kennard-Robertsonの不等式が表している状況では二つの物理量の測定 は全く独立に行われる。両者の測定に全く相関はなく、別々の測定で得られた値を比較しているだけであ る。また、測定によって得られる値も誤差がないと仮定している。全く異なる状況で成り立つ似たような 式が長い間混同されてきたが、測定課程を考慮したときに成り立つ関係を改めて考察する必要がある。

14.2.2 誤差と擾乱

間接測定の模型に基づいて、測定過程に依存した不確定性関係を導くことが本節での目的である。系 $|\psi\rangle$ の物理量 A を測定することを考える。測定はプローブの状態を測定することによって行われ、対応する物理量を M_A とする。 M_A を測ることで A の情報を得る。そのとき、プローブの作用が系の物理量 B にどのような影響を与えるかを調べる。

まず、次の量を定義する。

$$\epsilon^2(A) = \langle \Psi | \hat{E}^2 | \Psi \rangle, \qquad \hat{E} = \hat{U}^{\dagger} (\hat{I}_{\rm s} \otimes \hat{M}_A) \hat{U} - \hat{A} \otimes \hat{I}_{\rm p}$$
(14.39)

プローブの M_A を測定したものが本来ほしい量 A からどれだけずれているかを表したものである。つまり、 $\epsilon(A)$ は誤差 (error)を表す。また、系とプローブの相互作用によって物理量 B の値がどれだけ乱されるか を表す擾乱 (じょうらん、disturbance) $\eta(B)$ を次のように定義する²。

$$\eta^{2}(B) = \langle \Psi | \hat{D}^{2} | \Psi \rangle, \qquad \hat{D} = \hat{U}^{\dagger} (\hat{B} \otimes \hat{I}_{p}) \hat{U} - \hat{B} \otimes \hat{I}_{p} \qquad (14.40)$$

これらの量について成り立つ一般的な関係式を導こう。まず、次の交換関係が成り立つことに注意する。

$$[\hat{I}_{s} \otimes \hat{M}_{A}, \hat{B} \otimes \hat{I}_{p}] = 0 \tag{14.41}$$

 \hat{M}_A はプローブに作用し、 \hat{B} は系に作用する演算子なので両者は交換する。これに両側からユニタリー演 算子をかけて相互作用した状態を考えると、

$$0 = \hat{U}^{\dagger} [\hat{I}_{\mathrm{s}} \otimes \hat{M}_{A}, \hat{B} \otimes \hat{I}_{\mathrm{p}}] \hat{U} = [\hat{U}^{\dagger} (\hat{I}_{\mathrm{s}} \otimes \hat{M}_{A}) \hat{U}, \hat{U}^{\dagger} (\hat{B} \otimes \hat{I}_{\mathrm{p}}) \hat{U}] = [\hat{E} + \hat{A} \otimes \hat{I}_{\mathrm{p}}, \hat{D} + \hat{B} \otimes \hat{I}_{\mathrm{p}}]$$
(14.42)

 $^{^{2}\}langle\Psi|\hat{E}|\Psi
angle$ および $\langle\Psi|\hat{D}|\Psi
angle$ は $_{0}$ とは限らない。 $_{0}$ のときに成り立つ関係を問題 [14-4] で扱う。

より、

$$[\hat{D}, \hat{E}] + [\hat{B} \otimes \hat{I}_{p}, \hat{E}] + [\hat{D}, \hat{A} \otimes \hat{I}_{p}] = [\hat{A} \otimes \hat{I}_{p}, \hat{B} \otimes \hat{I}_{p}]$$
(14.43)

を得る。これは演算子についての恒等式を表す。状態 $|\Psi\rangle$ で期待値をとり三角不等式 $|x+y| \leq |x|+|y|$ を用いると

$$|\langle \Psi | [\hat{D}, \hat{E}] | \Psi \rangle| + |\langle \Psi | [\hat{B} \otimes \hat{I}_{p}, \hat{E}] | \Psi \rangle| + |\langle \Psi | [\hat{D}, \hat{A} \otimes \hat{I}_{p}] | \Psi \rangle| \ge |\langle \Psi | [\hat{A} \otimes \hat{I}_{p}, \hat{B} \otimes \hat{I}_{p}] | \Psi \rangle|$$
(14.44)

となる。各項は交換関係の期待値の絶対値なので Kennard-Robertson の不等式 (14.37) を用いることができる。左辺 3 つの項に対して不等式を用いると

$$\sigma(D)\sigma(E) + \sigma(B)\sigma(E) + \sigma(D)\sigma(A) \ge \frac{1}{2} |\langle \Psi | [\hat{A} \otimes \hat{I}_{p}, \hat{B} \otimes \hat{I}_{p}] | \Psi \rangle| = \frac{1}{2} |\langle \psi | [\hat{A}, \hat{B}] | \psi \rangle|$$
(14.45)

という不等式を得る。 $\sigma(E)$ 、 $\sigma(D)$ はそれぞれ上で定義した誤差、擾乱と比較すると $\sigma(E) \leq \epsilon(A)$ 、 $\sigma(D) \leq \eta(B)$ が成り立つことがわかる。このようにして小澤の不等式(Ozawa inequality)を得る(2003年)。

$$\epsilon(A)\eta(B) + \sigma(B)\epsilon(A) + \sigma(A)\eta(B) \ge \frac{1}{2}|\langle \psi|[\hat{A},\hat{B}]|\psi\rangle|$$
(14.46)

左辺第1項に誤差と擾乱の積があらわれていることに注意してほしい。つまり、左辺第2項と第3項を無 視するとHeisenbergの不確定性関係とよぶべき式が得られる³。左辺第2項と第3項は非負であることか ら、この不等式によるとHeisenbergの不確定性関係を破るような場合がある可能性が生じる。

小澤の不等式は三角不等式を用いたり、各項について Kennard–Robertson の不等式を用いるなど比較的 緩い不等式である。等号が成り立つことはありえない。より強い制限をもった不等式は 2013 年、Branciard によって導かれている(問題 [14–5])。そしてそのような不等式は実験的にも確かめられている。

³ここで定義した誤差と擾乱の積について成り立つ関係を Heisenberg の不確定性関係とよぶべきかどうかは議論の余地があるだろう。系とプロープに作用する二つの演算子 \hat{A} 、 \hat{B} に対して $\hat{E}_A = \hat{A} - \hat{A} \otimes \hat{I}_p$ 、 $\hat{E}_B = \hat{B} - \hat{B} \otimes \hat{I}_p$ を定義して $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$ が成り立つとすると、小澤の不等式と同様の関係式を得ることができる。問題 [14-4] では、このような演算子の一例を考えてさらにいくつかの条件を課すことによって成り立つ Arthurs–Kelly–Goodman の不等式 (Arthurs–Kelly–Goodman inequality) を導く。

14.3 問題

 $[\mathbf{A}]$

[14-1] 間接測定

(a). 第 14.1.2 節で考えた二つめの例 (系に影響を与える測定)について、Kraus 演算子 \hat{M}_n 、POVM 演算子 \hat{E}_n 、確率 $p_n = \text{Tr} \hat{E}_n \hat{\rho}_s$ 、測定後の密度演算子 $\hat{\rho}'_s$ を求めよ。

(b). 次の例について、(a) と同様の計算を行え。

$$\hat{U}|0\rangle_{\rm s}|0\rangle_{\rm p} = \sqrt{\epsilon}|0\rangle_{\rm s}|0\rangle_{\rm p} + \sqrt{1-\epsilon}|0\rangle_{\rm s}|1\rangle_{\rm p} \tag{14-1.1}$$

$$\hat{U}|1\rangle_{\rm s}|0\rangle_{\rm p} = \sqrt{\epsilon}|1\rangle_{\rm s}|0\rangle_{\rm p} - \sqrt{1-\epsilon}|1\rangle_{\rm s}|1\rangle_{\rm p} \tag{14-1.2}$$

 $0 \le \epsilon \le 1$ である。

(c). 本文で挙げた例や (a)、(b) の例において、ユニタリー演算子 \hat{U} は Kraus 演算子を用いてどのよう に書けるか。わかる範囲でよい。

[14-2] 誤差と擾乱

第 14.1.2 節で考えた三つめの例 (誤差のある測定) について、 $\hat{A} = \hat{\sigma}_{s}^{z}$ 、 $\hat{B} = \hat{\sigma}_{s}^{x}$ 、 $\hat{M}_{A} = \hat{\sigma}_{p}^{z}$ としたとき、 誤差 $\epsilon(A)$ と擾乱 $\eta(B)$ を計算せよ。また、 $\epsilon = 0$ 、 $\epsilon = 1/2$ のときそれぞれ結果がどのようになるか調べよ。

$[\mathbf{B}]$

[14-3] Schrödinger の不確定性関係

任意の規格化された状態 $|\psi\rangle$ について

$$|\psi_A\rangle = (\hat{A} - \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle)|\psi\rangle \tag{14-3.1}$$

$$|\psi_B\rangle = (\hat{B} - \langle \psi | \hat{B} | \psi \rangle) | \psi \rangle \tag{14-3.2}$$

を定義する。 \hat{A} 、 \hat{B} はエルミート演算子を表す。このとき、次の式を示せ。

$$\sigma^{2}(A)\sigma^{2}(B) \ge |\langle\psi_{A}|\psi_{B}\rangle|^{2} = \left|\frac{1}{2}\langle\{\hat{A},\hat{B}\}\rangle - \langle\hat{A}\rangle\langle\hat{B}\rangle\right|^{2} + \left|\frac{1}{2}\langle[\hat{A},\hat{B}]\rangle\right|^{2}$$
(14-3.3)

期待値 $\langle \rangle$ は状態 $|\psi\rangle$ についてのものである。また、 $\{\hat{A}, \hat{B}\} = \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}, \ \sigma^2(A) = \langle \hat{A}^2 \rangle - \langle \hat{A} \rangle^2$ である ($\sigma^2(B)$ も同様)。
[14-4] 同時測定の不確定性

第 14.2.2 節と同じ設定を考える。 \hat{B} に対するプローブの物理量を M_B とし、その演算子が \hat{M}_A と交換するとする。

$$[\hat{M}_A, \hat{M}_B] = 0 \tag{14-4.1}$$

したがって、両者は互いに影響を及ぼさず同時に測定することができる($\hat{A} \ge \hat{B}$ は交換するとは限らないことに注意)。また、次の関係が任意の系の状態 $|\psi\rangle$ について成り立つとする。

$$\langle \Psi | (\hat{A} \otimes \hat{I}_{p}) | \Psi \rangle = \langle \Psi | \hat{U}^{\dagger} (\hat{I}_{s} \otimes \hat{M}_{A}) \hat{U} | \Psi \rangle$$
(14-4.2)

$$\langle \Psi | (\hat{B} \otimes \hat{I}_{\rm p}) | \Psi \rangle = \langle \Psi | \hat{U}^{\dagger} (\hat{I}_{\rm s} \otimes \hat{M}_B) \hat{U} | \Psi \rangle \tag{14-4.3}$$

(a). 次の式をそれぞれ示せ。

$$\operatorname{Tr}_{\mathbf{p}}\hat{E}_{A}|\Phi\rangle\langle\Phi| = 0 \tag{14-4.4}$$

$$\langle \Psi | [\hat{A} \otimes \hat{I}_{\rm p}, \hat{E}_A] | \Psi \rangle = 0 \tag{14-4.5}$$

 $\hat{E}_A = \hat{U}^\dagger (\hat{I}_{
m s} \otimes \hat{M}_A) \hat{U} - \hat{A} \otimes \hat{I}_{
m p}$ である。

(b). 次の式を示せ。

$$\langle \Psi | [\hat{E}_A, \hat{E}_B] | \Psi \rangle = -\langle \psi | [\hat{A}, \hat{B}] | \psi \rangle \tag{14-4.6}$$

 \hat{E}_B は \hat{E}_A と同様に定義される。また、この式を用いて $\sigma(E_A)$ と $\sigma(E_B)$ について成り立つ不確定性関係を求めよ。

(c).

$$\sigma^2(M_A) = \langle \Psi | \hat{U}^{\dagger} (\hat{I}_{\rm s} \otimes \hat{M}_A)^2 \hat{U} | \Psi \rangle - \langle \Psi | \hat{U}^{\dagger} (\hat{I}_{\rm s} \otimes \hat{M}_A) \hat{U} | \Psi \rangle^2 \tag{14-4.7}$$

とする。 $\sigma^2(M_B)$ も同様に定義される。このとき、次の不確定性関係を示せ。

$$\sigma(M_A)\sigma(M_B) \ge |\langle \psi | [\hat{A}, \hat{B}] | \psi \rangle| \tag{14-4.8}$$

$[\mathbf{C}]$

[14-5] Branciard の不等式

a、bを実成分をもつ単位ベクトル、x、yを互いに直交する実ベクトルとする。また、 $e_x = \frac{x}{|x|}$ 、 $e_y = \frac{y}{|y|}$ とし、 a_{\perp} および b_{\perp} を次のように定義する。

$$a_{\perp} = \sqrt{1 - (\boldsymbol{a} \cdot \boldsymbol{e}_x)^2} \tag{14-5.1}$$

$$b_{\perp} = \sqrt{1 - (\boldsymbol{b} \cdot \boldsymbol{e}_y)^2} \tag{14-5.2}$$

(a). 次の式を示せ。

(i)
$$b_{\perp} \ge |\mathbf{b} \cdot \mathbf{e}_{x}|$$

(ii) $|\mathbf{b} \cdot \mathbf{e}_{x}| \ge |(\mathbf{a} \cdot \mathbf{b})(\mathbf{a} \cdot \mathbf{e}_{x})| - \sqrt{1 - (\mathbf{a} \cdot \mathbf{b})^{2}}a_{\perp}$
(iii) $a_{\perp}^{2} + b_{\perp}^{2} + 2\sqrt{1 - (\mathbf{a} \cdot \mathbf{b})^{2}}a_{\perp}b_{\perp} \ge (\mathbf{a} \cdot \mathbf{b})^{2}$
(iv) $(\mathbf{a} - \mathbf{x})^{2} + (\mathbf{b} - \mathbf{y})^{2} + 2\sqrt{1 - (\mathbf{a} \cdot \mathbf{b})^{2}}|\mathbf{a} - \mathbf{x}||\mathbf{b} - \mathbf{y}| \ge (\mathbf{a} \cdot \mathbf{b})^{2}$

(b). 第14.2.2 節と同じ設定を考え、次の状態を定義する。

$$|\boldsymbol{a}\rangle = \frac{\hat{A} \otimes \hat{I}_{\rm p} - \langle \Psi | \hat{A} \otimes \hat{I}_{\rm p} | \Psi \rangle}{\sigma(A)} |\Psi\rangle \qquad (14-5.3)$$

$$|\boldsymbol{b}\rangle = \frac{\hat{B} \otimes \hat{I}_{\mathrm{p}} - \langle \Psi | \hat{B} \otimes \hat{I}_{\mathrm{p}} | \Psi \rangle}{\sigma(B)} |\Psi\rangle \tag{14-5.4}$$

$$|\boldsymbol{x}\rangle = \frac{\hat{U}^{\dagger}(\hat{I}_{\rm s}\otimes\hat{M}_A)\hat{U} - \langle\Psi|\hat{A}\otimes\hat{I}_{\rm p}|\Psi\rangle}{\sigma(A)}|\Psi\rangle \tag{14-5.5}$$

$$|\boldsymbol{y}\rangle = \frac{\hat{U}^{\dagger}(\hat{B}\otimes\hat{I}_{\rm p})\hat{U} - \langle\Psi|\hat{B}\otimes\hat{I}_{\rm p}|\Psi\rangle}{\sigma(B)}|\Psi\rangle \qquad (14\text{-}5.6)$$

これらの状態と (a) の不等式を用いて、次の Branciard の不等式 (Branciard inequality)を示せ。

$$\epsilon^{2}(A)\sigma^{2}(B) + \eta^{2}(B)\sigma^{2}(A) + 2\sqrt{\sigma^{2}(A)\sigma^{2}(B) - \left|\frac{1}{2}\langle\psi|[\hat{A},\hat{B}]|\psi\rangle\right|^{2}}\epsilon(A)\eta(B) \ge \left|\frac{1}{2}\langle\psi|[\hat{A},\hat{B}]|\psi\rangle\right|^{2}(14-5.7)$$

(c). Branciard の不等式は小澤の不等式よりも強い条件であることを示せ。

付 録 A 期末試験問題

問1.

次のハミルトニアンを考える。

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \lambda \hat{V} \tag{E1.1}$$

Ĥ₀の固有値・固有状態が全て次のように求まっているとする。

$$\hat{H}_0|n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)}|n^{(0)}\rangle, \qquad \langle m^{(0)}|n^{(0)}\rangle = \delta_{m,n}$$
(E1.2)

m、nは状態の指標を表す。エネルギー固有値に縮退はないとする。このとき、ハミルトニアンの固有値問 題を解く。

$$\hat{H}|\tilde{n}(\lambda)\rangle = E_n(\lambda)|\tilde{n}(\lambda)\rangle$$
 (E1.3)

 $[1-1] \lambda 0 2 次までの固有値 E_n(\lambda) および \lambda 0 1 次までの固有状態 <math>|\tilde{n}(\lambda)\rangle$ を表す公式を導け。 $\langle n^{(0)}|\tilde{n}(\lambda)\rangle = 1$ とする。

[1-2] 次の2準位系を考える。

$$\hat{H}_0 = v\left(|0\rangle\langle 1| + |1\rangle\langle 0|\right), \qquad \hat{V} = \epsilon_0|0\rangle\langle 0| + \epsilon_1|1\rangle\langle 1|$$
(E1.4)

 $\{|0\rangle, |1\rangle\}$ は正規直交基底、 ϵ_0 、 ϵ_1 、vは実数で $v \neq 0$ とする。エネルギー固有値 $E_n(\lambda)$ を λ の2次まで、 固有状態 $|\tilde{n}(\lambda)\rangle$ を λ の1次まで求めよ。

問2.

[2-1] 次の交換関係を満たす演算子を考える。

$$[\hat{a}, \hat{a}^{\dagger}] = 1, \qquad [\hat{a}, \hat{a}] = 0, \qquad [\hat{a}^{\dagger}, \hat{a}^{\dagger}] = 0$$
 (E2.1)

 $[\hat{A},\hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$ である。また、 $\hat{a}|0\rangle = 0$ を満たす規格化された状態 $|0\rangle$ が存在するとする。このとき、 $\hat{a}^{\dagger}\hat{a}$ の固有値と規格化された固有状態の求められるものを全て求めよ。答えを書くだけでなく、論理的に導け。

[2-2] 反交換する演算子の場合に [2-1] と同様の問いに答えよ。

$$\{\hat{a}, \hat{a}^{\dagger}\} = 1, \qquad \{\hat{a}, \hat{a}\} = 0, \qquad \{\hat{a}^{\dagger}, \hat{a}^{\dagger}\} = 0$$
(E2.2)

 $\{\hat{A},\hat{B}\}=\hat{A}\hat{B}+\hat{B}\hat{A}$ である。

問3.

[3-1] Hilbert 空間の次元が 2 の系を考える。次のような密度演算子で表される状態 $\hat{\rho}_1 \geq \hat{\rho}_2$ の違いは 何か。また、それらを見分けるには何をどのように測定すればよいか。

$$\hat{\rho}_1 = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1\\ 1 & 1 \end{pmatrix} \tag{E3.1}$$

$$\hat{\rho}_2 = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0\\ 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{E3.2}$$

 $[\mathbf{3}-\mathbf{2}]$ 2次元の系 1 と 2次元の系 2の合成状態 $|\psi\rangle$ を考える。

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \Big(|0\rangle_1 |1\rangle_2 + |1\rangle_1 |0\rangle_2\Big) \tag{E3.3}$$

 $|0\rangle$ および $|1\rangle$ は $\hat{\sigma}^z$ の固有状態を表す。系 1 の量 σ_1^x を測定して +1 の値を得たとする。このとき、系 2 の 状態はどのようになっているか。

索 引

Arthurs-Kelly-Goodman の不等式, 171 Bell 状態, 163 Bell の不等式, 155 Berry 位相, 66 Bloch 球, 142 Bloch ベクトル, 142 Bohr 半径, 17 Born 近似, 59 Bose-Einstein 統計, 91 Bose 粒子, 91 Branciard の不等式, 174 CHSH 不等式, 155 Cirel'son 限界, 156 CNOT ゲート, 161 Dirac 描像, 55 Fermi-Dirac 統計, 91 Fermi 運動量, 116 Fermi エネルギー, 116 Fermi の黄金律, 58 Fermi 波数, 116 Fermi 面, 116 Fermi 粒子, 91 Feynman ダイアグラム, 119 Floquet 演算子, 73 Floquet の定理, 73 Fock 空間, 103 Fubini-Study 距離, 40 Grassmann 数, 112 Hadamard $\mathcal{F} - \mathcal{F}$, 161 Hartree-Fock 近似, 123 Hartree 近似, 82 Heisenberg 描像, 5 Heisenberg 方程式, 6 Heisenberg 模型, 129 Hellmann–Feynman の定理, 41 Hilbert 空間, 1 Hubbard 模型, 129

Ising 模型, 132 Kennard-Robertson の不等式, 170 Kraus 演算子, 167 Landau-Zener 遷移, 75 Levi-Civita テンソル, 15 Lewis-Riesenfeld 不变量, 74 Mandelstam-Tamm 不等式, 76 Moyal 積, 148 Néel 状態, 130 NOT ゲート, 161 Pauli 演算子, 16 Pauli 行列, 16 Pauliの排他律, 91 Planck 定数, 4 POVM, 167 Rayleigh-Ritz の変分法, 80 EPR パラドックス, 13, 155 Runge–Lenz ベクトル, 7 Schmidt 分解, 152 Schmidt $\exists \nu 2, 153$ Schrödinger の猫, 13 Schrödinger 描像, 5 Schrödinger 方程式, 5 Slater 行列式, 94 Stark 効果, 36 STIRAP, 68 Tsirelson 限界, 156 van der Waals 相互作用, 42 von Neumann エントロピー, 154 von Neumann 方程式, 138 Weyl 順序, 5 Wigner 結晶, 121 Wigner 表示, 148 Zeeman 効果, 63

位相ゲート、161 エネルギー,5 エルミート演算子、2 エルミート共役、2 演算子,2 エンタングルメント,13,150 エンタングルメントエントロピー、154 小澤の不等式,171 回転波近似,70 角運動量, 4, 15 核磁気共鳴,63 隠れた変数、155 重ねあわせの原理,2 **完全**系,2 完全混合状態,143 完全性,2 幾何学的位相,66 規格化,1 球面調和関数, 16, 95 **強結合模型**,126 強磁性相互作用,127 共役,1 **局所実在論**,155 巨視的波動関数,144 クローン禁止定理、165 交換関係,4 交換相互作用,127 交替磁化,130 誤差,170 古典ビット,160 固有状態.2 固有值,2 固有ベクトル,2 混合状態, 139 ジェリウム模型,118 磁化,130 時間順序積、54 時間発展演算子,53 自己無撞着方程式,82 射影演算子, 3, 33 射影仮設,3 射影測定,166 縮約密度演算子,153 **準位統**計,41 **純粋化**, 154 純粋状態,139

純粋度,140 準静的過程,57 準粒子,117 昇降演算子,7 状態ベクトル,1 擾乱,170 真空,103 水素原子,7 スター積,148 スピン, 10, 15 正規直交関係,2 正規直交性,2 生成消滅演算子,102 摂動展開, 8, 27 摂動ハミルトニアン,27 摂動論,27 選択則.32 相互作用,81 相互作用描像,55 測定演算子,167 束縛状態,28 第二量子化,108 断熱過程,57 断熱近似,64 断熱状態, 65 超交換相互作用,127 超対称性,22 調和振動子,6 定常状態,5 デルタ関数、3 電磁場,11 動的不変量,74 特異値, 153 **特異値分解**, 152 内積.1 熱力学極限,10 場.11 パーマネント,94 波束の収縮.3 波動関数,3 場の演算子,102 ハミルトニアン,5 パラ統計,113 反強磁性相互作用, 129 非対角長距離秩序,144

非調和振動子,8 不確定性関係, 4, 169 平均場近似,82 ヘリウム原子, 39 **変分法**, 8, 77 **密度演算子**,138 密度行列,138 無摂動ハミルトニアン, 27 誘導 Raman 断熱遷移, 68 橫磁場 Ising 模型, 85, 132 **量子回路**, 162 量子ゲート,161 **量子状態**,1 量子速度限界,75 量子テレポーテーション, 162 量子電気力学,36 量子ビット,160 量子もつれ、13、150