量子力学III

1. エネルギー準位に対する近似法
   - 時間に依存しない摂動論
   - 変分法
2. 時間に依存する摂動論
   摂動による遷移
3. 散乱理論
4. 多体論入門
   多粒子系の記述
5. 半古典近似（WKB 法）

参考書

- ガシオロヴィッツ「量子力学」（丸善）
- K. Konishi and G. Paffuti
  "Quantum Mechanics - A new introduction"
  (Oxford 出版)
- E. Merzbacher, "Quantum Mechanics"

講義ノート

東北大 → 物理 → 原子核理論
→ 萩野浩一 → 講義（東北大学）

1. エネルギー準位に対する近似法

i) 時間に依存しない摂動論

$$H = H_0 + \underbrace{\lambda V}_{\text{小さな補正}}$$

H_0の固有値，固有関数はわかっているとする：

$$H_0 \phi_n = E_n^{(0)} \phi_n$$

$H\psi = E\psi$　すなわち　$\boxed{(H_0 + \lambda V)\psi_n = E_n \psi_n}$

を解きたい。

$\lambda = 0$　であれば　$\psi_n = \phi_n$　　$E_n = E_n^{(0)}$

$$\longrightarrow \quad \psi_n = \psi_n^{(0)} + \lambda \psi_n^{(1)} + \lambda^2 \psi_n^{(2)} + \cdots$$
$$E_n = E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \cdots$$

とおく　$(\psi_n^{(0)} = \phi_n)$。

$|\lambda| \ll 1$　であれば

$$|\lambda \psi_n^{(1)}| \gg |\lambda^2 \psi_n^{(2)}| \gg \cdots$$
$$|\lambda E_n^{(1)}| \gg |\lambda^2 E_n^{(2)}| \gg \cdots$$

のはず。

$$(H_0+\lambda V)(\psi_n^{(0)}+\lambda\psi_n^{(1)}+\cdots)$$
$$=(E_n^{(0)}+\lambda E_n^{(1)}+\cdots)(\psi_n^{(0)}+\lambda\psi_n^{(1)}+\cdots)$$

λの次数ごとに整理

λの0次： $H_0\psi_n^{(0)}=E_n^{(0)}\psi_n^{(0)}$

λの1次： $\cancel{\lambda} V\psi_n^{(0)}+\cancel{\lambda} H_0\psi_n^{(1)}=\cancel{\lambda} E_n^{(1)}\psi_n^{(0)}+\cancel{\lambda} E_n^{(0)}\psi_n^{(1)}$

λの2次：

⋮

λの1次 (1次の摂動量)

$$V\underbrace{\psi_n^{(0)}}_{=\phi_n}+H_0\psi_n^{(1)}=E_n^{(1)}\underbrace{\psi_n^{(0)}}_{=\phi_n}+E_n^{(0)}\psi_n^{(1)}$$

$\langle\phi_n| \rightarrow$

$$\langle\phi_n|V|\phi_n\rangle+\cancel{\underbrace{\langle\phi_n|H_0}_{=E_n^{(0)}\langle\phi_n|}|\psi_n^{(1)}\rangle}$$

$$=E_n^{(1)}\underbrace{\langle\phi_n|\phi_n\rangle}_{=1}+\cancel{E_n^{(0)}\langle\phi_n|\psi_n^{(1)}\rangle}$$

$\rightsquigarrow$ $$\boxed{E_n^{(1)} = \langle \phi_n | V | \phi_n \rangle}$$

波動関数 $|\psi_n^{(1)}\rangle = \sum_{k \neq n} C_{nk}^{(1)} |\phi_k\rangle$ と展開

$k = n$ は波動関数全体の規格化を通じて考慮。

$$V|\phi_n\rangle + \sum_{k\neq n} C_{nk}^{(1)} \underbrace{H_0 |\phi_k\rangle}_{= E_k^{(0)} |\phi_k\rangle} = E_n^{(1)} |\phi_n\rangle + E_n^{(0)} \sum_{k\neq n} C_{nk}^{(1)} |\phi_k\rangle$$

$\langle \phi_k | \phi_{k'} \rangle = \delta_{kk'}$

$\langle \phi_k | \longrightarrow$
$$\langle \phi_k | V | \phi_n \rangle + C_{nk}^{(1)} E_k^{(0)} = E_n^{(0)} C_{nk}^{(1)}$$

$\rightsquigarrow$ $$C_{nk}^{(1)} = \frac{\langle \phi_k | V | \phi_n \rangle}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}$$

$\rightsquigarrow$ $$\boxed{\psi_n^{(1)} = \sum_{k\neq n} \frac{\langle \phi_k | V | \phi_n \rangle}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} |\phi_k\rangle}$$

同様に高次の摂動補正も見積ることができる。

ii) 変分法

ハミルトニアンを $H = H_0 + \lambda V$ に分けれない時に有効（← 摂動の高次項の見積りは大変）。

・変分原理

任意の規格化された波動関数に対して

$$\langle \Psi | H | \Psi \rangle \geq E_0$$

Hの最小固有値
（基底状態のエネルギー）

（証明）
$$|\Psi\rangle = \sum_n C_n |\Phi_n\rangle \quad \text{と展開}$$

Hの固有関数
$H|\Phi_n\rangle = E_n|\Phi_n\rangle$

$$\langle \Psi | H | \Psi \rangle = \sum_n |C_n|^2 E_n \geq \underbrace{\sum_n |C_n|^2}_{=1} E_0 = E_0$$

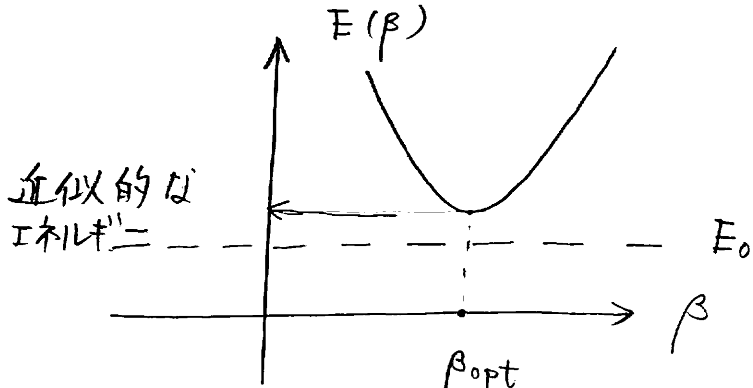
$\langle \Psi | \Psi \rangle = 1$

試行関数　$\psi(x, \beta)$ を用意する。

β ← パラメーター

$$E(\beta) \equiv \frac{\langle \psi(\beta) | H | \psi(\beta) \rangle}{\langle \psi(\beta) | \psi(\beta) \rangle} \geq E_0$$

⇓　左辺がなるべく小さくなるように β を選べば、最も基底状態に近い解が得られる。



（一番最もらしい β の値）

$$\frac{\partial E(\beta)}{\partial \beta} = 0$$ となる点を探す。

（具体的な例）

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 + \alpha x^4$$ の基底状態を求める。

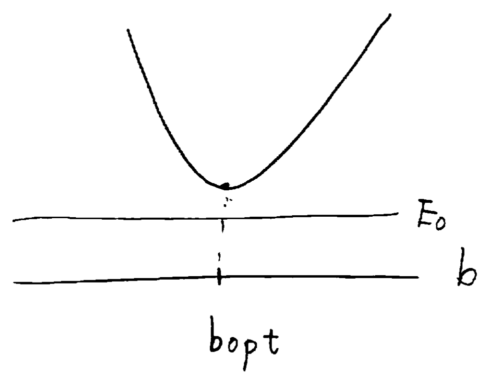
$\alpha \to$ 小 の時は摂動論。α が小さくない時は摂動論は困難。

試行関数として（例えば）

$$\psi(x) = (\pi b)^{-\frac{1}{4}} e^{-\frac{x^2}{2b^2}}$$

を仮定。

$$\longrightarrow \quad E(b) = \frac{\langle\psi|H|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle} = \frac{\hbar^2}{4mb^2} + \frac{m\omega^2}{4}b^2 + \frac{3\alpha}{4}b^4$$



- 2次の微分方程式を解く代わりに
（少数の）パラメーターの最適化（計算がより簡単）

- 近似の質はどのような試行関数を用意したかによる

○レイリー・リッツ法

$$\Psi = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \phi_n$$ （完全系による展開 → exact）

→ $$\Psi = \sum_{n=1}^{N} c_n \phi_n$$ 有限個数で基底を打ち切り（数値計算で必要）

有限個数で完全系を切断（truncate）
→ 近似的な解

展開係数 $\{c_n\}$ を変分パラメーターとして変分原理を適用：$\dfrac{\langle\Psi|H|\Psi\rangle}{\langle\Psi|\Psi\rangle}$ がなるべく小さくなるように展開係数 $\{c_n\}$ を決定する（レイリー・リッツ法）。

$\{c_n\} \rightarrow \{c_n + \delta c_n\}$ とした時に $\dfrac{\langle\Psi|H|\Psi\rangle}{\langle\Psi|\Psi\rangle}$

が $\{\delta c_n\}$ の一次の範囲で不変。

$$0 = \delta \frac{\langle\Psi|H|\Psi\rangle}{\langle\Psi|\Psi\rangle} = \frac{\sum_{n,n'} (c_n^* + \delta c_n^*)(c_{n'} + \delta c_{n'}) \langle\phi_n|H|\phi_{n'}\rangle}{\sum_n |c_n + \delta c_n|^2}$$

$$- \frac{\sum_{n,n'} c_n^* c_{n'} \langle\phi_n|H|\phi_{n'}\rangle}{\sum_n |c_n|^2}$$

(note) $$\frac{1}{\sum_n |c_n + \delta c_n|^2} \sim \frac{1}{\sum_n |c_n|^2 + \delta c_n^* c_n + \delta c_n c_n^*}$$

$$\sim \frac{1}{\sum_n |c_n|^2} \left(1 - \frac{\sum_n \delta c_n^* \cdot c_n}{\sum_n |c_n|^2} - \frac{\sum_n \delta c_n \cdot c_n^*}{\sum_n |c_n|^2}\right)$$

$$\to\ 0 \sim \frac{1}{\sum_n |C_n|^2} \sum_{n,n'} \left(C_n^* \delta C_{n'} + C_{n'} \delta C_n^* \right) \langle \Phi_n | H | \Phi_{n'} \rangle$$

$$- \underbrace{\frac{\sum_{n,n'} C_n^* C_{n'} \langle \Phi_n | H | \Phi_{n'} \rangle}{\sum_n |C_n|^2}}_{= E} \left(\frac{\sum_n \delta C_n^* C_n}{\sum_n |C_n|^2} + \frac{\sum_n \delta C_n C_n^*}{\sum_n |C_n|^2} \right)$$

$$= \frac{1}{\sum_n |C_n|^2} \left\{ \sum_n \delta C_n^* \left(\sum_{n'} \langle \Phi_n | H | \Phi_{n'} \rangle C_{n'} - E C_n \right) + c.c. \right\}$$

これがどのような $\{\delta C_n\}$ に対して成り立つためには

$$\sum_{n'=1}^{N} \underbrace{\langle \Phi_n | H | \Phi_{n'} \rangle}_{H_{nn'}} C_{n'} = E C_n$$

$N \times N$ 次元の行列の対角化

(note) $\quad H \Psi = E \Psi$

$$\to\ H \sum_{n'=1}^{N} C_{n'} \Phi_{n'} = E \sum_{n'=1}^{N} C_{n'} \Phi_{n'}$$

$$\langle \Phi_n | \to \quad \sum_{n'=1}^{N} \langle \Phi_n | H | \Phi_{n'} \rangle C_{n'} = E C_n$$