第２章まとめ

第２章で扱っている問題＝孤立系における時間発展

時間発展演算子$\mathcal{U}$

初期状態 $|\Phi(t_0)\rangle$ が、時間発展して $|\Phi(t);t_0\rangle$ になるとき、その発展の様子は時間発展演算子$\mathcal{U}(t,t_0)$ で記述されると仮定する。

$$|\Phi(t);t_0\rangle = \mathcal{U}(t,t_0)|\Phi(t_0)\rangle. \tag{1}$$

孤立系においては確率が保存されると仮定すると、

$$\begin{aligned}1 &= \langle\Phi(t);t_0|\Phi(t);t_0\rangle = \langle\Phi(t_0)|\mathcal{U}^\dagger(t,t_0)\mathcal{U}(t,t_0)|\Phi(t_0)\rangle \\ &= \langle\Phi(t_0)|\Phi(t_0)\rangle\end{aligned}$$

が成り立つべきである。

$\mathcal{U}$ の性質 (要請)

要請 1. $\mathcal{U}^\dagger(t,t_0)\mathcal{U}(t,t_0) = \mathcal{U}(t,t_0)\mathcal{U}^\dagger(t,t_0) = 1,$
要請 2. $\mathcal{U}(t_2,t_0) = \mathcal{U}(t_2,t_1)\mathcal{U}(t_1,t_0)$

$t = t_0 + dt$ を考えると、テイラー展開より、$\mathcal{U}(t_0+dt,t_0) = 1 + u(t_0)dt + \mathcal{O}(dt^2)$. ここで、

$$\frac{1}{-i\hbar}u(t_0) \equiv H(t_0) \tag{2}$$

を（時刻 t_0 における）ハミルトニアンという。$\mathcal{U}$ は無次元であるべきなので、H はエネルギーの次元をもっている。

$\mathcal{U}$ の要請 1 より、

$$\begin{aligned}\mathcal{U}(t+dt,t_0) - \mathcal{U}(t,t_0) &= \mathcal{U}(t+dt,t)\mathcal{U}(t,t_0) - \mathcal{U}(t,t_0) \\ &= (1 - iH(t)dt/\hbar)\mathcal{U}(t,t_0) - \mathcal{U}(t,t_0) \\ &= -i(H(t)/\hbar)\mathcal{U}(t,t_0)dt.\end{aligned}$$

よって次のシュレディンガー方程式が成立。

$\mathcal{U}$ に対するシュレディンガー方程式

$$i\hbar\tfrac{\partial}{\partial t}\mathcal{U}(t,t_0) = H(t)\mathcal{U}(t,t_0).$$

とりあえず、H が時間に依存しない場合の解、

$$\mathcal{U}(t,t_0) = \exp[-iH(t-t_0)/\hbar]$$

を抑えておこう。以下では、そのような場合のみ考える。

$\mathcal{U}$ のシュレディンガー方程式より、ケット $|\Phi(t);t_0\rangle = \mathcal{U}(t,t_0)|\Phi(t_0)\rangle$ に対して次が成立。

$|\Phi(t)\rangle$ に対するシュレディンガー方程式

$$i\hbar\tfrac{\partial}{\partial t}|\Phi(t);t_0\rangle = H(t)|\Phi(t);t_0\rangle.$$

エネルギー固有ケット

エネルギー固有ケットからなる正規直交完全系 $\{|E,\lambda\rangle\}_{E,\lambda}$ は、特に大切である。[1] ここで、λ は縮退状態を区別するラベル。これらは、エネルギー固有方程式

$$H|E,\lambda\rangle = E|E,\lambda\rangle \tag{3}$$

から定義される。この方程式は、$|\Phi(t)\rangle = e^{-iEt/\hbar}|E,\lambda\rangle$ の場合の「$|\Phi(t)\rangle$ に対するシュレディンガー方程式」と全く同じものであるため、しばしば「時間に依存しないシュレディンガー方程式」とも呼ばれる。

シュレディンガー描像とハイゼンベルク描像

1. シュレディンガー描像＝ケットは時間依存する、演算子は時間依存しない
2. ハイゼンベルク描像＝ケットは時間依存しない、演算子は時間依存する
3. 物理量の期待値はどちらも同じ値なので、２つの描像は考え方・記述の仕方の違いしかなく本質的に同等である

シュレディンガー描像

ケット: $|\Phi(t)\rangle = \mathcal{U}(t)|\Phi(0)\rangle$

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\Phi(t)\rangle = H|\Phi(t)\rangle$$

演算子: $A^{(S)}$ 時間依存性なし

ハイゼンベルク描像

ケット: $|\Phi(0)\rangle$ 時間依存性なし

演算子: $A^{(H)}(t) = \mathcal{U}^\dagger(t)A^{(S)}\mathcal{U}(t)$

$$\frac{d}{dt}A^{(H)}(t) = \frac{1}{i\hbar}[A^{(H)}(t), H]$$

調和振動子

ハミルトニアン

$$H = \sum_{j=1}^{M}\left(\frac{p_j^2}{2m_j} + \frac{m_j\omega_j^2}{2}x_j^2\right) \tag{4}$$

で表わされる系を自由度 M の調和振動子系という。

$$a_j \equiv \sqrt{\frac{m_j\omega_j}{2\hbar}}\left(x_j + \frac{ip_j}{m_j\omega_j}\right), \tag{5}$$

$$a_j^\dagger \equiv \sqrt{\frac{m_j\omega_j}{2\hbar}}\left(x_j - \frac{ip_j}{m_j\omega_j}\right). \tag{6}$$

---

[1] 通常、ヒルベルト空間として、$\mathcal{E} = \{|E,\lambda\rangle\}_{E,\lambda}$ が正規直交完全系になるものが選ばれる。$\mathcal{E}$ が正規直交完全系でないようなヒルベルト空間が必要な系においては、エネルギーという物理量が量子状態を指定する上で有用ではないかもしれない。

これらは、

$$[a_i, a_j^\dagger] = \delta_{i,j} \tag{7}$$

を満たす。個数演算子 N_j を

$$N_j \equiv a_j^\dagger a_j \tag{8}$$

で定義。ハミルトニアンは、

$$\begin{aligned} H &= \sum_j \hbar\omega_j \left(a_j^\dagger a_j + \frac{1}{2} \right) & (9) \\ &= \sum_j \hbar\omega_j \left(N_j + \frac{1}{2} \right) & (10) \end{aligned}$$

とかける。

　エネルギー固有状態は、

$$\begin{aligned} |n_1, n_2, \cdots, n_M\rangle &= \frac{1}{\sqrt{n_1! n_2! \cdots n_M!}} (a_1^\dagger)^{n_1} (a_2^\dagger)^{n_2} \cdots (a_M^\dagger)^{n_M} |0, 0, \cdots, 0\rangle, & (11) \\ H|n_1, n_2, \cdots, n_M\rangle &= (n_1\hbar\omega_1 + n_2\hbar\omega_1 + \cdots + n_M\hbar\omega_M)|n_1, n_2, \cdots, n_M\rangle & (12) \end{aligned}$$

である。

補足：プロパゲーター

　プロパゲーターは、エネルギー固有状態 $H(\boldsymbol{x}')u_\alpha(\boldsymbol{x}') = E_\alpha u_\alpha(\boldsymbol{x}')$ を用いて。

$$\begin{aligned} K(\boldsymbol{x}'', t; \boldsymbol{x}', t_0) &= \langle \boldsymbol{x}'' | \mathcal{U}(t, t_0) | \boldsymbol{x}' \rangle \\ &= \sum_\alpha u_\alpha(\boldsymbol{x}'') u_\alpha^*(\boldsymbol{x}') e^{-iE_\alpha(t-t_0)/\hbar} \end{aligned}$$

とかける。これに対し、

$$K^R(\boldsymbol{x}'', t; \boldsymbol{x}', t_0) = K(\boldsymbol{x}'', t; \boldsymbol{x}', t_0)\theta(t - t_0) \tag{13}$$

を定義する。[2] すると、

$$\begin{aligned} \left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - H(\boldsymbol{x}'') \right) K^R(\boldsymbol{x}'', t; \boldsymbol{x}', t_0) &= \left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t}K - H(\boldsymbol{x}'')K \right) \theta(t - t_0) + i\hbar K \frac{\partial}{\partial t}\theta(t - t_0) \\ &= 0 + i\hbar K(\boldsymbol{x}'', t; \boldsymbol{x}', t_0)\delta(t - t_0) \\ &= i\hbar K(\boldsymbol{x}'', t_0; \boldsymbol{x}', t_0)\delta(t - t_0) \\ &= i\hbar\delta(\boldsymbol{x}'' - \boldsymbol{x}')\delta(t - t_0) \end{aligned}$$

となる。（教科書 2.5.12 式）

[2]添え字 R は、Retarded(遅延) の意味。対になる概念として、Advanced(先進) バージョン $K^A = K\theta(t_0 - t)$ もある。

自由粒子の K^R

この方程式は、$V(\boldsymbol{x}'')=0$ の場合は簡単にとける。まず並進対称性より、$K^R(\boldsymbol{x}'',t;\boldsymbol{x}',t_0)=K^R(\boldsymbol{x}''-\boldsymbol{x}',t-t_0)$ となる。変数 $\boldsymbol{y}=\boldsymbol{x}''-\boldsymbol{x}', s=t-t_0$ についてのフーリエ変換

$$\tilde{K}^R(\boldsymbol{k},\omega) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \int d^3k K^R(\boldsymbol{y},s)\exp[-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{y}+i\omega s]$$

を定義すると、[3] デルタ関数の性質 $\delta(x)=\int \frac{dk}{2\pi}e^{ikx}$ より、

$$K^R(\boldsymbol{y},s) = \frac{1}{(2\pi)^4}\int_{-\infty}^{\infty} ds \int d^3y \tilde{K}^R(\boldsymbol{k},\omega)\exp[i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{y}-i\omega s]$$

ともかける。すると、

$$\begin{aligned}\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial s}+\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\right)K^R(\boldsymbol{y},t-t_0) &= \int\frac{d\omega d^3k}{(2\pi)^4}\left(\hbar\omega-\frac{\hbar^2\boldsymbol{k}^2}{2m}\right)\tilde{K}^R(\boldsymbol{k},\omega)\exp[i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{y}-i\omega s]\\ &= i\hbar\delta(\boldsymbol{y})\delta(s)\\ &= i\hbar\int\frac{d\omega d^3k}{(2\pi)^4}\exp[i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{y}-i\omega s]\end{aligned}$$

となる。これより積分の中身について、[4]

$$\tilde{K}^R(\boldsymbol{k},\omega)=\frac{i\hbar}{\hbar\omega+i\epsilon-E_{\boldsymbol{k}}}$$

が成り立つ。ここで、$E_{\boldsymbol{k}}\equiv\hbar^2\boldsymbol{k}^2/2m$、また、正の微小量 ϵ を顕わに書いておいた。

教科書 (2.5.20) 式に対応するのは、$K^R(\boldsymbol{y}=0,s)=(1/(2\pi)^4)\int d\omega[\int d^3y\tilde{K}^R(\boldsymbol{k},\omega)]e^{-i\omega s}$ であるから、教科書 (2.5.23) に対応するのは

$$\begin{aligned}\tilde{G}^R(\omega) &\equiv \frac{1}{i\hbar}\int d^3k\tilde{K}^R(\boldsymbol{k},\omega)\\ &= \int\sin\theta d\theta d\phi\int_0^{k_c}k^2dk\frac{1}{\hbar\omega+i\epsilon-E_k}\\ &= 4\pi\frac{2m}{\hbar^2}\sqrt{\frac{m}{2\hbar}}\int_0^{E_c}dE_k\frac{\sqrt{E_k}}{\hbar\omega+i\epsilon-E_k}.\end{aligned}$$

適当なカットオフ k_c で積分を抑えてある。この積分は実行可能であるが、[5] 見た目が複雑なので、ここでは虚部だけを見よう。デルタ関数の性質 $\delta(x-a)=\lim_{\epsilon\to 0}(1/\pi)\epsilon/[(x-a)+\epsilon^2]$ を用いると、

$$\begin{aligned}\rho(\omega) &\equiv -\frac{1}{\pi}\mathrm{Im}\tilde{G}^R(\omega)\\ &= \mathrm{const.}\int dE_k\sqrt{E_k}\delta(\hbar\omega-E_k)\\ &= \mathrm{const.}\sqrt{\hbar\omega}.\end{aligned}$$

これは、(2.1.67) 式に対応する量である。

---

[3]普通、時間 s に対する積分を well-defined にするために正の微小量 $\epsilon>0$ を用いて、$\theta(s)\to\theta_\epsilon(s)=\theta(s)e^{-\epsilon s}$ に置き換えた $K^R(\boldsymbol{y},s)=K(\boldsymbol{y},s)\theta_\epsilon(s)$ を考える。必要な積分を実行した最後に $\epsilon\to+0$ の極限をとる。教科書では、(2.5.23) 式の積分を well-def にするために、(2.5.24) 式の置き換え $E\to E+i\epsilon$ を用いているが、同じことである。

[4]正確には、$\int dsd^3ye^{i\omega' s-ik'y}$ を両辺について行う。

[5]岩波数学公式 I の P98 などを参照。