量子力学 3 量子力学 GII, 演習問題 (1)
時間に依存する摂動論

加藤雄介

2018 年 10 月 10 日

記号の詳細は講義ノート (第 1 回 09/25、第 2 回 10/02) を参照のこと。

目的

- 時間に依存する摂動論を具体的な問題に適用し、計算に慣れる
- 時間に依存する摂動論が摂動論の成立条件の下で厳密解と一致することを具体例を通して確かめる。
- 静磁場下におけるスピン 1/2 の系の固有関数に親しむ。
- Rabi の 2 準位模型とスピン 1/2 の系の等価性を理解する。
- スピン 1/2 の系を例に断熱定理の成立条件を理解する。

問題 I − 01「Rabi の厳密解と摂動論の比較」

1. Rabi の 2 準位模型を初期時刻 $t_0 = 1$, 初期状態 $|\psi(0)\rangle = |\phi_1\rangle$ の下で摂動論を用いて解き、一次摂動では非共鳴のとき ($\Delta\omega = \omega + \frac{E_1^{(0)} - E_2^{(0)}}{\hbar} \neq 0$)
$$c_2^{(1)}(t) = \frac{V_{21}}{\mathrm{i}\hbar} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\Delta\omega t}{2}} \frac{\sin\left(\frac{\Delta\omega t}{2}\right)}{\left(\frac{\Delta\omega}{2}\right)} \tag{1}$$
共鳴のとき ($\Delta\omega = 0$)
$$c_2^{(1)}(t) = \frac{V_{21} t}{\mathrm{i}\hbar} \tag{2}$$
となることを示せ。
2. Rabi の厳密解において $|c_2(t)| \ll 1$ となる条件を (a) 非共鳴のとき (b) 共鳴のときにそれぞれ求めよ。
3. 前問の条件が成立するとき Rabi の厳密解が摂動論の結果 (1) と一致することを示せ。

問題 I − 02「静磁場下でのスピン 1/2 の系のエネルギー固有関数」

スピン 1/2 の系のヒルベルト空間は $\hat{S}_z$ の固有関数
$$\hat{S}_z|\uparrow\rangle = \frac{\hbar}{2}|\uparrow\rangle, \quad \hat{S}_z|\downarrow\rangle = -\frac{\hbar}{2}|\downarrow\rangle \tag{3}$$
で張られる 2 次元空間であり、その元 $|\psi\rangle$ は
$$|\psi\rangle = u|\uparrow\rangle + v|\downarrow\rangle, \quad u, v \in \mathbb{C} \tag{4}$$
は 2 次元複素ベクトル
$$\begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} \tag{5}$$

で表す。このとき (5) に対する行列

$$\underbrace{\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}1 & 0 \\ 0 & -1\end{pmatrix}}_{\sigma_z} \tag{6}$$

が $|\psi\rangle$ に対する演算子 $\hat{S}_z$ に対応する。同様に、$\hat{S}_x$,$\hat{S}_y$ は それぞれ

$$\frac{\hbar}{2}\underbrace{\begin{pmatrix}0 & 1 \\ 1 & 0\end{pmatrix}}_{\sigma_x}, \quad \frac{\hbar}{2}\underbrace{\begin{pmatrix}0 & -\mathrm{i} \\ \mathrm{i} & 0\end{pmatrix}}_{\sigma_y} \tag{7}$$

に対応する ($\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ は Pauli 行列)。

1. $\hat{S}_x$ の固有値と固有関数をすべて挙げよ (固有関数は (5) の形で答えても (4) の形で答えてもよい) 。

   固有値 $\hbar/2$ の固有関数は $\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1 \\ 1\end{pmatrix}$ あるいは $\frac{|\uparrow\rangle+|\downarrow\rangle}{\sqrt{2}}$. 固有値 $-\hbar/2$ の固有関数は $\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1 \\ -1\end{pmatrix}$ あるいは $\frac{|\uparrow\rangle-|\downarrow\rangle}{\sqrt{2}}$.
2. $\hat{S}_y$ の固有値と固有関数をすべて挙げよ (固有関数は (5) の形で答えても (4) の形で答えてもよい)。

   固有値 $\hbar/2$ の固有関数は $\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1 \\ \mathrm{i}\end{pmatrix}$ あるいは $\frac{|\uparrow\rangle+\mathrm{i}|\downarrow\rangle}{\sqrt{2}}$. 固有値 $-\hbar/2$ の固有関数は $\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1 \\ -\mathrm{i}\end{pmatrix}$ あるいは $\frac{|\uparrow\rangle-\mathrm{i}|\downarrow\rangle}{\sqrt{2}}$.

磁場 $\boldsymbol{B}$ の下でのハミルトニアンは $-\boldsymbol{\mu}\cdot\boldsymbol{B}$ で与えられる。磁気モーメント $\boldsymbol{\mu}$ が電子由来のとき $\boldsymbol{\mu} = -g|\mu_{\mathrm{B}}|\hat{\boldsymbol{S}}$ である。これより

$$\mathcal{H} = g|\mu_{\mathrm{B}}|\hat{\boldsymbol{S}}\cdot\boldsymbol{B} \tag{8}$$

と表される。

3. g-因子 (g factor) の大きさを答えよ（有効数字一桁でよい.) $g \sim 2$
4. ボーア磁子（の大きさ）を電子質量、素電荷を用いて表せ。

   電子質量を m_{e}, 素電荷を $|e|$ とすると、$|\mu_{\mathrm{B}}| = |e|/(2m_{\mathrm{e}})$.
5. $\boldsymbol{B} = B\boldsymbol{e}_z$ のとき、エネルギー固有値と固有関数を求めよ。

   固有値 $g|\mu_{\mathrm{B}}|\hbar/2$ の固有関数は $\begin{pmatrix}1 \\ 0\end{pmatrix}$. 固有値 $-g|\mu_{\mathrm{B}}|\hbar/2$ の固有関数は $\begin{pmatrix}0 \\ 1\end{pmatrix}$.
6. $\boldsymbol{B} = B\boldsymbol{e}_x$ のとき、エネルギー固有値と固有関数を求めよ。

   固有値 $g|\mu_{\mathrm{B}}|\hbar/2$ の固有関数は $\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1 \\ 1\end{pmatrix}$. 固有値 $-g|\mu_{\mathrm{B}}|\hbar/2$ の固有関数は $\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1 \\ -1\end{pmatrix}$.
7. $\boldsymbol{B} = B\boldsymbol{e}_y$ のとき、エネルギー固有値と固有関数を求めよ。

   固有値 $g|\mu_{\mathrm{B}}|\hbar/2$ の固有関数は $\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1 \\ \mathrm{i}\end{pmatrix}$. 固有値 $-g|\mu_{\mathrm{B}}|\hbar/2$ の固有関数は $\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1 \\ -\mathrm{i}\end{pmatrix}$.

磁場が

$$\boldsymbol{B} = B_\perp\cos\phi\boldsymbol{e}_x + B_\perp\sin\phi\boldsymbol{e}_y + B_\parallel\boldsymbol{e}_z = B\sin\theta\cos\phi\boldsymbol{e}_x + B\sin\theta\sin\phi\boldsymbol{e}_y + B\cos\theta\boldsymbol{e}_z \tag{9}$$

($\cos\theta = B_\perp/\sqrt{B_\perp^2 + B_\parallel^2}$, $\sin\theta = B_\parallel/\sqrt{B_\perp^2 + B_\parallel^2}$, $0 \le \theta \le \pi$, $\le \phi < 2\pi$)

$$\mathcal{H} = \hbar\omega_0 M, \quad \omega_0 > 0, \quad M = \begin{pmatrix}\cos\theta & \sin\theta e^{-\mathrm{i}\phi} \\ \sin\theta e^{\mathrm{i}\phi} & -\cos\theta\end{pmatrix} \tag{10}$$

と与えられる。

8. 磁場はどの方向を向いているか図示せよ。
9. ω_0 を求めよ。

   $\omega_0 = \frac{g|\mu_{\mathrm{B}}|B}{2} = \frac{|e|B}{2m_{\mathrm{e}}}$

10. 行列 M の固有値と固有関数を求めよ。

固有値 1 の固有関数は $\begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\phi} \\ \sin\frac{\theta}{2} \end{pmatrix}$ 固有値-1 の固有関数は $\begin{pmatrix} \cos\frac{(\pi-\theta)}{2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\phi+\pi)} \\ \sin\frac{(\pi-\theta)}{2} \end{pmatrix}$

問題 I − 03「Rabi の 2 準位模型とスピン 1/2 の系の等価性」

磁場が

$$\boldsymbol{B}(t) = B\sin\theta\cos\omega t\boldsymbol{e}_x + B\sin\theta\sin\omega t\boldsymbol{e}_y + B\cos\theta\boldsymbol{e}_z \tag{11}$$

で与えられるとき、ハミルトニアンを (5) に対する行列としてあらわすと

$$\mathcal{H} = \hbar\omega_0\begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta e^{-\mathrm{i}\omega t} \\ \sin\theta e^{\mathrm{i}\omega t} & -\cos\theta \end{pmatrix} \tag{12}$$

と与えられる。これは Rabi の 2 準位模型と等価である。

$$\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \leftrightarrow |\phi_1\rangle, \quad \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \leftrightarrow |\phi_2\rangle \tag{13}$$

と対応させるとき $E_1^{(0)}, E_2^{(0)}, V_{21}$ に相当するものはなにか。

$E_1^{(0)} = -\hbar\omega_0\cos\theta,\ E_2^{(0)} = \hbar\omega_0\cos\theta,\ V_{21} = \hbar\omega_0\sin\theta$

問題 I − 04「スピン 1/2 の系での磁場変化に対する断熱条件」

スピン 1/2 の系でのハミルトニアンが (8)、時刻 t における磁場が

$$\boldsymbol{B}(t) = (B\sin(2\pi t/T), 0, B\cos(2\pi t/T)), \quad B > 0, \quad T > 0 \tag{14}$$

で与えられるとする。このとき $t = 0 \sim T$ までの間に磁場は大きさを保ちながら $+z$ 方向から $+x$ 方向まで向きを変える。

1. この時間変化が十分ゆっくりであり、断熱定理が成り立つために周期 T が満たすべき条件を $T, g, |\mu_\mathrm{B}|, B, \hbar$ のうち必要なものを用いて表せ。
   $(g|\mu_\mathrm{B}|B)^{-1} \ll T.$
2. $t = 0$ でこの系の状態が $\psi = |\uparrow\rangle$ で表されるとき、$t = T$ ではどんな状態にあるか。(4) の形で答えよ。位相因子は求めなくてよい。
   $\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$
3. $t = 0$ でこの系の状態が $\psi = |\downarrow\rangle$ で表されるとき、$t = T$ ではどんな状態にあるか。(4) の形で答えよ。位相因子は求めなくてよい。
   $\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$
4. $t = 0$ でこの系の状態が $\psi = |\uparrow\rangle$ で表されるとき、$t = T/2$ ではどんな状態にあるか。(4) の形で答えよ。位相因子は求めなくてよい。
   $\begin{pmatrix} \cos\frac{\pi}{8} \\ \sin\frac{\pi}{8} \end{pmatrix} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} \sqrt{2+\sqrt{2}} \\ \sqrt{2-\sqrt{2}} \end{pmatrix}$