量子力学 III 第1回レポート問題 2016年 10月 14日出題

第1問:動く調和振動子型ポテンシャル中の粒子

一定速度 v で動く調和振動子型ポテンシャル中の粒子のハミルトニアンは

$$H(t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{m\omega^2}{2} (x - vt)^2 = H_0 + H_1(t)$$
 (1)

で与えられる。ただし、

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx} + \frac{m\omega^2}{2} x^2,$$
 (2)

$$H_1(t) = \frac{m\omega^2}{2} (-2vtx + v^2t^2)$$
 (3)

とおいた。

- (1) H_0 のエネルギー固有値と対応するエネルギー固有状態をすべて求めよ。
- (2) 初期時刻 t=0 での状態は H_0 の基底状態であったとする。時刻 t>0 において H_0 の各々のエネルギー固有状態が観測される確率を v の一次の精度で求めよ。また,この結果が妥当であるための条件を論ぜよ。
- (3) (2) と同じ設定で、時刻 t>0 での位置の期待値を v の一次の精度で求めよ。

第2問:回転する調和振動子型ポテンシャル中の粒子

2次元調和振動子型ポテンシャル中の粒子のハミルトニアンを考える。

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{d^2}{dx^2} + \frac{d^2}{dy^2} \right) + \frac{m\omega_x^2}{2} x^2 + \frac{m\omega_y^2}{2} y^2. \tag{4}$$

- (1) H_0 のエネルギー固有値と対応するエネルギー固有状態をすべて求めよ。
- (2) H_0 で考えられているポテンシャルが、原点を中心として角速度 Ω で回転しているとする。この系の時間発展は時間に依存するハミルトニアン $H(t) = H_0 + H_1(t)$ で記述される。 $H_1(t)$ を求めよ。
- (3) 時刻 t=0 での状態は H_0 の基底状態であったとする。系が H(t) によって時間発展したとき,時刻 t>0 で H_0 の各々のエネルギー固有状態が観測される確率を $\omega_x-\omega_y$ の一次の精度で求めよ。また,この結果が妥当であるための条件を論ぜよ。
- (4) (3) と同じ設定で、時刻 t>0 での角運動量の期待値を $\omega_x \omega_y$ の一次の精度で求めよ。

第3問:定積分の計算

(必要なら誘導に従って)次の定積分を計算せよ。

$$I_1 = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin x}{x} dx, \quad I_2 = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin^2 x}{x^2} dx. \tag{5}$$

(1) $\rho > 0$ に対して, Γ_{ρ} を集合 $\{\rho e^{i\theta} \in \mathbb{C} | \theta \in [0,\pi] \}$ に θ が 0 から π へ至る方向に向きを付けた 積分路とする。次の量を計算せよ。

$$I_1' = \lim_{R \to \infty} \int_{\Gamma_R} \frac{e^{iz}}{z} dz, \quad I_1'' = \lim_{\delta \to 0} \int_{\Gamma_\delta} \frac{e^{iz}}{z} dz.$$
 (6)

- (2) $I_1 \in I'_1$ および I''_1 を用いて表し、 I_1 を求めよ。
- (3) $\rho > 0$ に対して、 Γ_{ρ} を (1) と同じ積分路とする。次の量を計算せよ。

$$I_2' = \lim_{R \to \infty} \int_{\Gamma_R} \frac{1 - e^{2iz}}{z^2} dz, \quad I_2'' = \lim_{\delta \to 0} \int_{\Gamma_\delta} \frac{1 - e^{2iz}}{z^2} dz.$$
 (7)

(4) I_2 を I_2' および I_2'' を用いて表し, I_2 を求めよ。

参考問題:量子断熱定理

以下の手順に従って量子断熱定理を証明せよ。

設定: I = [0,1] と記す。H(s) を $s \in I$ でラベル付けされた時間に依存するハミルトニアン, $\{\epsilon_n(s)\}_{n=1}^N$ を各時刻 s における H(s) の固有値, $\psi_n(s)$ を固有値 $\epsilon_n(s)$ に属する H(s) の固有ベクトルとする。ただし, $\{\psi_n(s)\}_{n=1}^N$ は正規直交基底となるようにとる。さらに次のことを仮定する。

A1: 任意の時刻 s において、H(s) の固有値は縮退しない。さらに、I の内部で微分可能で導関数が $s\downarrow 0$ および $s\uparrow 1$ で極限値をもつ。

A2: $\psi_n(s)$ は I の内部で 2 階微分可能で導関数が $s\downarrow 0$ および $s\uparrow 1$ で極限値をもつ。

(1) $t \in [0,\tau]$ でラベル付けされた時間に依存するハミルトニアン $H_{\tau}(t)$ を $H_{\tau}(t) := H(t/\tau)$ で 定める。時間に依存したシュレーディンガー方程式

$$i\hbar \frac{d}{dt}\Psi_{\tau}(t) = H_{\tau}(t)\Psi_{\tau}(t) \tag{8}$$

の解 $\Psi_{\tau}(t)$ に対して,時間のスケールを変換した状態 $\Psi(s) \coloneqq \Psi_{\tau}(s\tau)$ を導入する。このとき, $\Psi(s)$ が満たす時間に関する微分方程式を求めよ。

(2) (1) で求めた微分方程式の解 $\Psi(s)$ を次のように展開する:

$$\Psi(s) = \sum_{n=1}^{N} c_n(s) \psi_n(s) e^{-i\tau \int_0^s \epsilon_n(s') ds'}.$$
 (9)

このとき、係数を並べたベクトル $C(s) = (c_1(s), ..., c_n(s))^{\mathrm{T}}$ は、ある行列 $A^{\tau}(s)$ を用いて

$$\frac{d}{ds}C(s) = -A^{\tau}(s)C(s) \tag{10}$$

の形の微分方程式を満たす。この行列 $A^{\tau}(s)$ を求めよ。

(3) 初期条件 C(0) のもとで、微分方程式 (10) の解はある行列 $U^{\tau}(s)$ を用いて、

$$C(s) = U^{\tau}(s)C(0) \tag{11}$$

の形で与えられる。この行列 $U^{\tau}(s)$ を求めよ。

(4) 行列 D(s) を $A^{\tau}(s)$ の対角成分を取り出したもの, すなわち $D(s) = \operatorname{diag}(A_{11}^{\tau}(s), \cdots, A_{NN}^{\tau}(s))$ とする。さらに $B^{\tau}(s) = A^{\tau}(s) - D(s)$ とする。このとき,行列 M(s) と $G^{\tau}(s)$ が存在して,

$$i\tau \int_0^s B^{\tau}(s')ds' = G^{\tau}(s)M(s)G^{\tau}(s)^* - G^{\tau}(0)M(0)G^{\tau}(0)^*$$
$$-\int_0^s G^{\tau}(s')\frac{dM(s')}{ds'}G^{\tau}(s')^*ds' \tag{12}$$

が成り立つことを示せ。また行列 M(s) と $G^{\tau}(s)$ を求めよ。

(5) 行列 $U^{\tau}(s)$ および D(s) を上で定めたものとする。このとき

$$\lim_{\tau \to \infty} U^{\tau}(s) = e^{-\int_0^s D(s')ds'}$$
 (13)

が成り立つことを示せ。

補足:行列のノルム

 $n \times n$ 複素行列の全体を $M_n(\mathbb{C})$ とする。 $A \in M_n(\mathbb{C})$ に対して,そのノルム ||A|| を

$$||A|| \coloneqq \sup_{\boldsymbol{x} \in \mathbb{C}^n \setminus \{0\}} \frac{||A\boldsymbol{x}||}{||\boldsymbol{x}||} \tag{14}$$

で定める。ただし、ベクトル $\boldsymbol{x}=(x_1,x_2,\cdots,x_n)$ のノルムは $\|\boldsymbol{x}\|=\left(\sum_{j=1}^n|x_j|^2\right)^{1/2}$ である。これは、(結合代数上の) ノルムの公理

$$||A|| \ge 0, \quad ||A|| = 0 \Leftrightarrow A = 0, \quad A \in M_n(\mathbb{C}), \tag{15}$$

$$\|\lambda A\| = |\lambda| \|A\|, \quad \lambda \in \mathbb{C}, \ A \in M_n(\mathbb{C}), \tag{16}$$

$$||A + B|| \le ||A|| + ||B||, \quad A, B \in M_n(\mathbb{C}), \ (\Xi \beta \Lambda \otimes \Xi)$$
 (17)

$$||AB|| \le ||A|| ||B||, \quad A, B \in M_n(\mathbb{C}) \tag{18}$$

を満たし、 $M_n(\mathbb{C})$ に距離位相を導入する。これにより、例えば写像 $f: \mathbb{R} \to M_n(\mathbb{C})$ の連続性を議論することが可能になる。つまり、写像 $f: \mathbb{R} \to M_n(\mathbb{C})$ について、

$$\lim_{x \to x_0} f(x) = F \in M_n(\mathbb{C}) \stackrel{\text{def}}{\Leftrightarrow} \lim_{x \to x_0} ||f(x) - F|| = 0.$$
 (19)

重要な性質として、 $I\subset \mathbb{R}$ を閉区間とし $f:I\to M_n(\mathbb{C})$ を連続な写像とすると、積分 $\int_I f(x)dx$ が定義されて、

$$\left\| \int_{I} f(x) dx \right\| \le \int_{I} \|f(x)\| dx \tag{20}$$

が成り立つ。