量子力学 Tips

〜量子力学の表示形式について〜

KENZOU

2008 年 5 月 31 日

♣ 五月も晦日で、これからいよいよ梅雨の時期を迎えようとしている朝、少し日焼けした顔でキャサリンが K 氏を訪ねてきた。

- キャサリン：K さん、おはようございます。今日は爽やかなお天気ですね。今年の梅雨入りは、全般的に「平年並み」で、梅雨明けは「やや遅め」と予想されているわね。夏の到来が遅れる可能性が高いとされているけど、沖縄・奄美両地方については気象庁が 5 月 22 日に「梅雨入りしたとみられる」と発表しているのね。
- K 氏：そうだね。地球温暖化でいろいろ騒がれているけど、キチンと梅雨の時期が訪れるのは四季の移り変わりをが感じられていいよね。最も雨ばかり降られても困るけど。ところで、今日は何の用だい。
- キャサリン:はい、今日、お訪ねしたのは他でもないの、量子力学でシュレーディンガー表示とかハイゼンベルグ表示、相互作用表示というのがあるでしょう。一つの力学系でも、見る立場によってその状態が違った形式で表示されるのね。もっとも、ニュートン力学でも、実験室座標系とか重心座標系とか、座標系のとり方がいろいろあったけど、量子力学の場合はそのあたりの話とちょっと違うのね。今日はそのあたりのお話をお伺いできればと思ってお訪ねしたの。
- K 氏：そうなんだ。え〜っと、量子力学系の状態変化 (時間変化) の表し方としては、3 通りあるんだ。一つは、力学系に作用する演算子は時間に依存しないけど、状態関数（状態ベクトル）が時間的に変化していくという表し方で、これはシュレーディンガー表示（シュレーディンガー描像）と呼ばれている。もう一つは、力学系に作用する演算子が時間的に変化し、状態関数は時間的に変化しないという捉え方で、これはハイゼンベルグ表示と呼ばれる。最後の 3 つ目は、上の 2 つの中間的な捉え方で、これは相互作用表示と呼ばれる。相互作用表示というから、相互作用をしている系に有力な表示で、状態関数はシュレーディンガー方程式にしたがって時間変化し（ただしハミルトニアンは相互作用ハミルトニアン）、演算子の方は相互作用のないハイゼンベルグの運動方程式によって時間変化するというものなんだ。
ということで、ざっくり言えば、量子力学は系の状態変化を演算子という観測装置で観測するだろう。この場合、観測装置（演算子）は時間変化せずに、系の状態関数が時間変化すると捉えられるし、また、逆に系の状態は時間変化しないが、観測装置が時間変化すると捉えることもできる。シュレーディンガー表示とハイゼンベルグ表示はこの見方の違いというイメージで捉えておけばいいのじゃないかなぁ。いずれにしても得られる結果は同じになるし、また、ならないとおかしいよね。
- キャサリン：ふ〜ん、そういうことなんだ。
- K 氏：それではボチボチはじめようか。オッと、はじめる前にちょっと一言だけ。量子力学の表示でブラケット表示があるけど、これは必要に応じて使っていくことにするけどいいよね。
- キャサリン：結構よ、それではよろしくお願いします。

1　シュレーディンガー表示

量子力学系で測定という系の状態を乱すようなことが起きなければ、系の時間変化は因果律に従って展開していく。系の状態は状態関数 $\psi(\boldsymbol{x},t)$ で表され、状態関数の時間変化は (1.1) のシュレーディンガー方程式に従うものと仮定する。ここで H は系のハミルトニアンで、エルミート演算子とする。

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\boldsymbol{x},t) = H\psi(\boldsymbol{x},t) \tag{1.1}$$

この方程式を解くにあたって、系の状態関数は形式的に

$$\psi(\boldsymbol{x},t) = U(t)\psi(\boldsymbol{x}) \tag{1.2}$$

と時間 t の関数と位置座標 $\boldsymbol{x}$ の関数の**変数分離の形**で表せるものとする。$\psi(\boldsymbol{x})$ は、時刻 $t=0$ での任意の座標系の位置 $\boldsymbol{x}$ の関数で、$U(t)$ の方は時間推進演算子[1]と呼ばれている。
整理すると、**シュレーディンガー表示**とは、系の状態を記述する状態関数 $\psi(\boldsymbol{x},t)$ がユニタリー変換を使って形式的に (1.2) のように、変数分離の形で表されるような力学系の状態表示のことをいう。

ハミルトニアンは系の全エネルギーを表す演算子で、系の全エネルギーが時間的に変化しない、つまり定常状態にある場合と、系の全エネルギーが時間的に変化する 2 つのケースがある。以下に、その 2 つのケースについて調べていこう。――――――――――――――――――――――――――――

1.1 ハミルトニアンが時間 t を陽に含まない場合

ハミルトニアン H が時間をあらわに含まないときは、(1.2) を (1.1) に入れると

$$i\hbar\frac{\partial U(t)}{\partial t}\psi(\boldsymbol{x}) = HU(t)\psi(\boldsymbol{x}) \tag{1.3}$$

(1.3) の両辺から $\psi(\boldsymbol{x})$ をとりのぞくと、次の演算子方程式が得られる。

$$i\hbar\frac{\partial U(t)}{\partial t} = HU(t) \tag{1.4}$$

いまの場合、ハミルトニアンが時間 t を含まないので、(1.4) を $t=0$ で $U(0)=1$ という初期条件で形式的に解けば、時間推進演算子として

$$U(t) = e^{-iHt/\hbar} \tag{1.5}$$

が得られる。これを (1.2) に入れると

$$\psi(\boldsymbol{x},t) = e^{-iHt/\hbar}\psi(\boldsymbol{x}) \tag{1.6}$$

となって、状態関数の具体的な形がわかる。$U(t)$ と $U(t)$ の複素共役の積をとると、ハミルトニアンのエルミート性 $(H=H^\dagger)$ を利用して

$$U(t)U^\dagger(t) = e^{-iHt/\hbar}e^{iH^\dagger t/\hbar} = e^{-iHt/\hbar}e^{iHt/\hbar} = 1, \quad U^\dagger(t)U(t) = 1 \tag{1.7}$$

となり、時間推進演算子 $U(t)$ はユニタリー演算子であるということになる。以上のことを整理すると、**測定などで系が撹乱を受けない場合、状態ベクトルはユニタリー変換によって因果的に時間変化する**ということになります。

1.2 系が一定のエネルギー E をもつ場合

前項では時間推進演算子の具体的な形を求めた。ここでは、ハミルトニアン H が時間を陽に含まない定常状態におけるシュレーディンガーの方程式を導出していく。
H が時間 t を含まないから

$$\frac{\partial H}{\partial t} = 0 \tag{1.8}$$

この系でシュレーディンガー方程式 (1.1) の解が

$$\psi(\boldsymbol{x},t) = \psi(\boldsymbol{x})C(t) \tag{1.9}$$

と変数分離の形に書けるとして、これを (1.1) に入れると

$$i\hbar\frac{1}{C(t)}\frac{dC(t)}{dt} = \frac{H\psi(\boldsymbol{x})}{\psi(\boldsymbol{x})} = E(\text{一定}) \tag{1.10}$$

が得られる[2]。ということで、(1.10) から次の 2 つの方程式がでてくる。

$$H\psi(\boldsymbol{x}) = E\psi(\boldsymbol{x}) \tag{1.11a}$$
$$i\hbar\frac{dC(t)}{dt} = EC(t) \tag{1.11b}$$

[1]のちほど明らかになるが、$U(t)$ はユニタリー演算子となる。
[2]ところで、なぜ (1.10) の式が E（一定）とおけるのかという理由：左辺は t のみの関数で、右辺は $\boldsymbol{x}$ のみの関数となっており、t、$\boldsymbol{x}$ の値にかかわらずこの式が成り立つためには、両辺の値が t と $\boldsymbol{x}$ によらない定数でなければならない。

(1.11a) は、系が時間に依存しない、つまり $\psi(\boldsymbol{x},0)$ の場合のシュレーディンガー方程式に対応しており、この状態はハミルトニアン H のエネルギー固有状態で、E は固有値、$\psi(\boldsymbol{x},0)$ はこの系の固有関数になる。一般に直接時間に依存しない系は (1.11a) の形のシュレーディンガー方程式で表されるということは、初等量子力学で真っ先に学習しますね。

次に、(1.11b) を、初期条件 $t=0;\ C(0)=1$ のもとで解くと

$$C(t)=e^{-iEt/\hbar} \tag{1.12}$$

が得られ、これを (1.9) に入れると、

$$\psi(\boldsymbol{x},t)=\psi(\boldsymbol{x})e^{-iEt/\hbar} \tag{1.13}$$

となる。これは (1.6) の右辺のハミルトニアン H を固有値 E で置き換え、$\psi(\boldsymbol{x},0)$ を $\psi(\boldsymbol{x})$ で表したものになっている。この系の確率密度 $|\psi(\boldsymbol{x},t)|^2$ は

$$|\psi(\boldsymbol{x},t)|^2=\psi^*(\boldsymbol{x},t)\psi(\boldsymbol{x},t)=\psi^*e^{iEt/\hbar}\psi(\boldsymbol{x})e^{-iEt/\hbar}=|\psi(\boldsymbol{x})|^2 \tag{1.14}$$

となって、**確率密度の時間変化がなく、系は定常状態にあることがわかる**[3]。

♣ *Q&A* ———

- キャサリン：冒頭、K さんが仰ったように、注目している系の状態ベクトルが時間に依存して変わっていく、そのダイナミクスはユニタリー変換で結ばれている、と捉えた場合がシュレーディンガー表示ということになるのね。この場合、観測量となる演算子は時間的に変化しない。ところで、ハミルトニアンが時間 t を陽に含まない定常状態のことをいま説明いただいたけど、ハミルトニアンが時間 t を陽に含む場合はどうなるのかしら？
- K 氏：うん、そうだね、相互作用を取り込んだ場合だね。系は相互作用によっていわゆる状態遷移を起こすのだけど，このような系の取り扱いは相互作用表示のセクションで触れるから楽しみにしておいて。
- キャサリン：わかりました。

2 ハイゼンベルグ表示

ハイゼンベルグ表示では、**状態ベクトル $\psi(\boldsymbol{x},t)$ は時間変化せずに、力学量に対応する演算子が時間に依存する**、つまり

$$\frac{d\psi(\boldsymbol{x})}{dt}=0 \tag{2.1}$$

であるときの形式をハイゼンベルグ表示という。以下、ハイゼンベルグ表示には添字 H を、シュレーディンガー表示には添字 s を使うことにする。ハイゼンベルグ表示とシュレーディンガー表示の関係は

$$\psi_H(\boldsymbol{x})=U(t)^{-1}\psi_s(\boldsymbol{x},t) \tag{2.2}$$

である。状態関数 $\psi_H(\boldsymbol{x})$ は、時間に依存してないことに留意。
時間推進演算子 $U(t)=e^{-iHt/\hbar}$ を (2.2) に入れて

$$\begin{aligned}\psi_H(\boldsymbol{x})&=U^{-1}\psi_s(\boldsymbol{x},t)=e^{\frac{iH}{\hbar}t}\,\psi_s(\boldsymbol{x},t)\\&=e^{\frac{iH}{\hbar}t}\,\psi_s(\boldsymbol{x})\,e^{-\frac{iH}{\hbar}t}\end{aligned} \tag{2.3}$$

が得られる。時刻 $t=0$ のときは、

$$U(0)=U^{-1}(0)=1$$

であるから、(2.3) より

$$\psi_H(\boldsymbol{x})=\psi_s(\boldsymbol{x},0) \tag{2.4}$$

となって、両表示での状態関数は一致する。

[3]ブラケット記法で書けば $|\psi(\boldsymbol{x},t)\rangle=U(t)\,|\psi(\boldsymbol{x})\rangle$。$\langle\psi(\boldsymbol{x},t)|\,\psi(\boldsymbol{x},t)\rangle=\left\langle\psi(\boldsymbol{x})\left|U^\dagger(t)U(t)\right|\psi(\boldsymbol{x})\rangle\right\rangle=\langle\psi(\boldsymbol{x})|\,\psi(\boldsymbol{x})\rangle$ となって、確率密度はユニタリー変換で変わらないことがわかる。

2.1 ハイゼンベルグの運動方程式

次に、ハイゼンベルグ表示での演算子の時間変化方程式を求めよう。エルミート演算子を $\boldsymbol{A}$ とし、シュレーディンガー表示での演算子 $\boldsymbol{A}$ 期待値は

$$|\psi_s\rangle = U(t)\,|\psi_H\rangle \longrightarrow \langle\psi_s| = \langle\psi_H|\,U^\dagger(t) \tag{2.5}$$

であることに留意して、

$$\langle\boldsymbol{A}\rangle = \langle\psi_s(t)|\,\boldsymbol{A}_s|\,\psi_s(t)\rangle = \left\langle\psi_H\left|U^\dagger\boldsymbol{A}_sU\right|\psi_H\right\rangle \tag{2.6}$$

となる。そこで $\boldsymbol{A}_H$ を

$$\boldsymbol{A}_H(t) = U^\dagger(t)\boldsymbol{A}_sU(t) \tag{2.7}$$

と定義する。これが**ハイゼンベルグ表示での演算子**である。

(2.7) を時間 t で微分すると，次のハイゼンベルグの運動方程式が得られる。

$$\begin{aligned}\frac{\partial\boldsymbol{A}_H(t)}{\partial t} &= \frac{\partial U^\dagger}{\partial t}\boldsymbol{A}_sU + U^\dagger\boldsymbol{A}_s\frac{\partial U}{\partial t}\\ &= \frac{iH}{\hbar}e^{iHt/\hbar}\boldsymbol{A}_se^{-iHt/\hbar} + e^{iHt/\hbar}\boldsymbol{A}_s\left\{e^{-iHt/\hbar}\left(-\frac{iH}{\hbar}\right)\right\}\\ &= \frac{i}{\hbar}\left\{H\left(e^{iHt/\hbar}\boldsymbol{A}_se^{-iHt/\hbar}\right) - \left(e^{iHt/\hbar}\boldsymbol{A}_se^{-iHt/\hbar}\right)H\right\}\\ &= \frac{i}{\hbar}\{H\boldsymbol{A}_H(t) - \boldsymbol{A}_H(t)H\}\\ &= \frac{i}{\hbar}[H,\boldsymbol{A}_H(t)]\end{aligned} \tag{2.8}$$

♣ *Q&A* ———

- キャサリン：ちょっとお話を整理すると，シュレーディンガー表示では，すべての時間的変化が状態関数によって表現され，演算子は時間的に変化しない。一方，ハイゼンベルグ表示では，すべての時間変化は演算子が担っており，状態関数の方は時間的に変化しない。ハイゼンベルグ表示とシュレーディンガー表示はユニタリー変換で結びついている，

  $$\psi_H(\boldsymbol{x}) = U(t)^{-1}\psi_s(\boldsymbol{x},t)$$

  ということね。シュレーディンガー表示の演算子 $\boldsymbol{A}_s$ に時間推進演算子の帽子をかぶせたもの

  $$\boldsymbol{A}_H = e^{iHt/\hbar}\boldsymbol{A}_se^{-iHt/\hbar}$$

  がハイゼンベルグ表示での演算子という格好ね。当然だけど 2 つの表示の期待値は一致しなければならないわね。

- K 氏：うん，ユニタリー変換で結びついているから双方とも同じ期待を与えるけど，計算で示すと

  $$|\psi_H(\boldsymbol{x})\rangle = e^{iHt/\hbar}\,|\psi_s(\boldsymbol{x},t)\rangle \longleftrightarrow \langle\psi_H(\boldsymbol{x})| = \langle\psi_s(\boldsymbol{x},t)|\,e^{-iHt/\hbar}$$

  で，ヘイゼンベルグ表示での演算子 $\boldsymbol{A}$ の期待値は

  $$\begin{aligned}\langle\psi_H(\boldsymbol{x})|\,\boldsymbol{A}_H|\,\psi_H(\boldsymbol{x})\rangle &= \left\langle\psi_s(\boldsymbol{x},t)\left|e^{-iHt/\hbar}e^{iHt/\hbar}\boldsymbol{A}_se^{-iHt/\hbar}e^{iHt/\hbar}\right|\psi_s(\boldsymbol{x},t)\right\rangle\\ &= \langle\psi_s(\boldsymbol{x},t)|\,\boldsymbol{A}_s|\,\psi_s(\boldsymbol{x},t)\rangle\end{aligned}$$

  となって、シュレーディンガー表示での期待値と一致するよね。つまり、どちらの表示を使っても同じ期待値を与えるというわけで、これで安心して両方の表示が使えるんだね。

- キャサリン：よく分かったわ。

- K 氏：さっ、それじゃ最後の相互作用表示へと話を進めようか。。。

- キャサリン：ちょっと頭が熱くなってきたので、このあたりでコーヒーブレイクでもしましょう。美味しいシュークリームを買ってきているから、ご馳走するわ。

- K 氏:うれしいねぇ、疲れたときには甘いものが一番だものね。それでは早速いただきま〜す。

3　相互作用表示

系のハミルトニアンが、相互作用のない自由粒子のハミルトニアン (H_0) と相互作用を表すハミルトニアン $H_{int}(t)$ の和で与えられ（$H = H_0 + H_{int}$）、$H_{int}(t)$ が摂動的に取り扱える場合には、この系の記述としてシュレーディンガー表示とハイゼンベルグ表示の中間的な表示となる相互作用表示という方法が便利である。
シュレーディンガー表示の状態関数を $\psi_s(\boldsymbol{x}, t)$、演算子を $\boldsymbol{A}$ とすると、相互作用表示では

$$\psi_{int}(\boldsymbol{x}, t) = e^{iH_0 t/\hbar}\psi_s(\boldsymbol{x}, t) \tag{3.1}$$

$$\boldsymbol{A}_{int}(t) = e^{iH_0 t/\hbar}\boldsymbol{A}\, e^{-iH_0 t/\hbar} \tag{3.2}$$

と表される。ここで $\psi_{int}(\boldsymbol{x}, t)$、$\boldsymbol{A}_{int}(t)$ は、それぞれ相互作用表示での状態関数、演算子である。これらは、次の方程式に従う。

$$i\hbar\frac{\partial \psi_{int}(\boldsymbol{x}, t)}{\partial t} = H_{int}\,\psi_{int}(\boldsymbol{x}, t) \tag{3.3}$$

$$i\hbar\frac{\partial \boldsymbol{A}_{int}(t)}{\partial t} = [\boldsymbol{A}_{int}(t), H_0] \tag{3.4}$$

(3.3) と (3.4) は、「**相互作用系での状態関数は時間に依存するシュレーディンガー方程式にしたがって時間変化し（ただし、全ハミルトニアンによってではなく、相互作用ハミルトニアンによって時間変化することに注意）、相互作用系での演算子は相互作用のない場合のハイゼンベルグの運動方程式にしたがって時間変化する**」ということを表している。

3.1　相互作用表示

3.1.1　状態関数の時間変化

作用系の全ハミルトニアン H が、

$$H = H_0 + H_{int} \tag{3.5}$$

で表され。相互作用系の状態関数 $\psi_{int}(\boldsymbol{x}, t)$ はシュレーディンガー方程式を満たすものとする。

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi_{int}(\boldsymbol{x}, t) = H_{int}\psi_{int}(\boldsymbol{x}, t) \tag{3.6}$$

ここで、相互作用系の状態関数を、ハミルトニアン H_0 による時間推進演算子

$$U_0(t) = e^{-iH_0 t/\hbar} \tag{3.7}$$

を用いて、次のように定義する。

$$\psi_{int}(\boldsymbol{x}, t) = U_0^{-1}(t)\psi_s(\boldsymbol{x}, t) = e^{iH_0 t/\hbar}\psi_s(\boldsymbol{x}, t) \tag{3.8}$$

$\psi_s(\boldsymbol{x}, t)$ はシュレーディンガー方程式を満たすので、(1.6) と (3.5) より

$$\psi_s(\boldsymbol{x}, t) = e^{-iHt/\hbar}\psi(\boldsymbol{x}) = e^{-\frac{i}{\hbar}(H_0 + H_{int})t}\psi(\boldsymbol{x}) \tag{3.9}$$

となり、ちょっとゴタゴタしたが，これを (3.8) に入れると、相互作用系での状態関数として

$$\psi_{int}(\boldsymbol{x}, t) = e^{-iH_{int}t/\hbar}\psi(\boldsymbol{x}) = U(t)\psi(\boldsymbol{x}) \tag{3.10}$$

が得られる。この右辺の $\psi(\boldsymbol{x})$ は時間に依存しない状態関数で、ハイゼンベルグ表示での状態関数である。
相互作用表示での状態関数の時間変化は，(3.10) を時間 t で微分すると

$$\begin{aligned}\hbar\frac{\partial \psi_{int}(\boldsymbol{x}, t)}{\partial t} &= H_{int}(t)e^{-iH_{int}t/\hbar}\psi(\boldsymbol{x}) \\ &= H_{int}(t)\psi(\boldsymbol{x}, t)_{int}\end{aligned} \tag{3.11}$$

これから，相互作用表示での状態関数は相互作用ハミルトニアン H_{int} にしたがって時間変化することになる。

3.1.2 演算子の時間変化

相互作用表示での演算子 $\boldsymbol{A}_{int}(t)$ を次のように定義する。

$$\begin{aligned}\boldsymbol{A}_{int}(t) &= e^{iH_0 t/\hbar}\boldsymbol{A}e^{-iH_0 t/\hbar} \\ &= U^{-1}(t)\boldsymbol{A}U(t) \end{aligned} \tag{3.12}$$

この時間変化は

$$i\hbar\frac{\partial A_{int(t)}}{\partial t} = -H_0 e^{iH_0 t/\hbar}\boldsymbol{A}e^{-iH_0 t/\hbar} + e^{iH_0 t/\hbar}\boldsymbol{A}H_0 e^{-iH_0 t/\hbar} \tag{3.13}$$

$$= [A_{int}(t), H_0] \tag{3.14}$$

となって，相互作用表示での演算子（観測量）は相互作用のない場合のハミルトニアン H_0 にしたがって時間変化するということになる。

♣ $Q\&A$ ———

- キャサリン：相互作用表示はうまく考えられているわね。解析力学からのアナロジーではハイゼンベルグの運動方程式でいいような気もするのだけど、だめかしら？
- K 氏：そうだね、ただ、相互作用が入ると、一般的にハイゼンベルグの運動方程式は解けないといわれている。相互作用表示は別名、朝永-Schwinger 表示と言われており、両博士がそれぞれ独立にこの表示の定式化をおこなわれたんだね。場の理論ではこの表示がよく使われるよ。というのは，場の量についてはあたかも相互作用のないように取り扱えるというのが大きなメリットなんだね。
- キャサリン：場の量子論か，その内勉強するわ。ところで，この表示の場合も期待値は同じ値を与えるんでしょうね。
- K 氏：やってみようか。

$$\begin{aligned}\langle \psi_{int}(t)\left|\boldsymbol{A}_{int}(t)\right|\psi_{int}(t)\rangle &= \left\langle \psi_H \left| e^{iH_{int}t/\hbar}e^{iH_0 t/\hbar}\boldsymbol{A}_s e^{-iH_0 t/\hbar}e^{-iH_{int}t/\hbar}\right| \psi_H \right\rangle \\ &= \left\langle \psi_H \left| e^{iHt/\hbar}\boldsymbol{A}_s e^{-iHt/\hbar}\right| \psi_H \right\rangle \\ &= \langle \psi_H \left|\boldsymbol{A}_H(t)\right| \psi_H\rangle \\ &= \langle \psi_s(\boldsymbol{x},t)\right| \boldsymbol{A}_s \left| \psi_s(\boldsymbol{x},t)\rangle \end{aligned}$$

となって，3 つの表示での期待値は同じ値を与えることがわかるね。

3.2 相互作用表示における変換関数

相互作用表示におけるシュレーディンガー方程式を積分していこう。$t = 0$ での相互作用表示とヘイゼンベルグ表示は一致するから

$$\psi_{int}(\boldsymbol{x}, t) = U(t)\psi(\boldsymbol{x}) \tag{3.15}$$

とおいたとき，

$$U(0) = 1 \tag{3.16}$$

である。(3.15) を (3.11) に入れると

$$i\hbar\frac{d}{dt}U(t) = H_{int}(t)U(t) \tag{3.17}$$

が $U(t)$ の満たす方程式で，(3.16) が初期条件となる。(3.17) を形式的に解いて積分方程式の形にすると

$$U(t) = 1 - \frac{i}{\hbar}\int_0^t dt_1 H_I(t_1)U(t_1) \tag{3.18}$$

ここで H_{int} を H_I とした。(3.18) で，$t=t_1$ と置き換えると

$$U(t_1) = 1 - \frac{i}{\hbar}\int_0^{t_1} H_I(t_2)U(t_2)dt_2 \tag{3.19}$$

これを (3.18) に入れ，同じことを繰り返していくと

$$\begin{aligned}
U(t) &= 1 + \left(-\frac{i}{\hbar}\right)\int_0^t H_I(t_1)\left[1 - \frac{i}{\hbar}\int_0^{t_1} H_I(t_2)U(t_2)dt_2\right]dt_1 \\
&= 1 + \left(-\frac{i}{\hbar}\right)\int_0^t H_I(t_1)dt_1 + \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 H_I(t_1)H_I(t_2)U(t_2) \\
&= 1 + \left(-\frac{i}{\hbar}\right)\int_0^t H_I(t_1)dt_1 + \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 H_I(t_1)H_I(t_2) \\
&\quad + \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^3 \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \int_0^{t_2} dt_3 H_I(t_1)H_I(t_2)H_I(t_3) \\
&\quad + \cdots + \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n \int_0^t dt_1 \cdots \int_0^{t_{n-1}} dt_n H_I(t_1)\cdots H_I(t_n) + \cdots \\
&= 1 + \sum_{n=1}^{\infty}\left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \cdots \int_0^{t_{n-1}} dt_n H_I(t_1)H_I(t_2)\cdots H_I(t_n)
\end{aligned} \tag{3.20}$$

が得られる。ただし，$H_I(t)$ と $H_I(t')$ とは $t \neq t'$ の時は必ずしも可換でないこと，また積分範囲からわかるように，$t > t_1 > t_2 > \cdots > t_{n-1} > t_n > 0$ であって，摂動演算子 $H_I(t)$ が時間の順序に左から右へ並んでいることに注意しておこう。ここで摂動展開の各項は

$$\text{第 1 項（第 0 次近似）：}\quad 1 \tag{3.21a}$$

$$\text{第 2 項（第 1 次近似）：}\quad \left(-\frac{i}{\hbar}\right)\int_0^t H_I(t_1)dt_1 \tag{3.21b}$$

$$\text{第 3 項（第 2 次近似）：}\quad \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2\int_0^t H_I(t_1)dt_1 \int_0^{t_1} H_I(t_2)dt_2 \tag{3.21c}$$

$$\vdots$$

$$\text{第 } (n+1) \text{ 項（第 } n \text{ 近似）：}\quad \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n\int_0^t H_I(t_1)dt_1 \int_0^{t_1} H_I(t_2)\cdots\int_0^{t_{n-1}} H_I(t_n)dt_n \tag{3.21d}$$

である。

3.2.1 フェルミの黄金律

さて，時間に依存する摂動を受けている場合の系の遷移確率を求めてみよう。ハミルトニアン H_0 の固有状態を ϕ_m とすると

$$H_0\phi_m = E_0\phi_m \tag{3.22}$$

無摂動系のハミルトニアン H_0 に対する解は，ϕ_m で展開して

$$\psi(t) = \sum_m C_m(t)e^{-iE_0t/\hbar}\phi_m \tag{3.23}$$

とおく。ϕ_m の規格直交性

$$\langle \phi_m | \phi_n \rangle = \delta_{mn} \tag{3.24}$$

を使うと，

$$C_m(t) = \langle \phi_m | \psi(t)\rangle e^{iE_0t/\hbar} = \langle \phi_m | e^{iH_0t/\hbar}\psi(t)\rangle \tag{3.25}$$

が得られる。いま，初期条件 $t=0$ で

$$C_n(0) = 1, \quad C_m(0) = 0 \quad (m \neq n) \tag{3.26}$$

が満たされているとき[4]，時刻 t において系が状態 m に見出される確率は

$$
\begin{aligned}
W_{mn} = |C_m(t)|^2 &= |\langle \phi_m| e^{iH_0t/\hbar}\psi(t)\rangle|^2 \\
&= |\langle \phi_m| \psi_{int}(t)\rangle|^2 \qquad (3.27)\\
&= |\langle \phi_m| U(t)\psi\rangle|^2 \qquad (3.28)
\end{aligned}
$$

となる。これから状態 ψ_n から ψ_m への遷移確率を計算するには $U(t)$ の行列要素 $\langle \psi_m |U(t)| \psi_n\rangle$ を求めればよい。第 1 次近似で求めると

$$
\langle \psi_m |U(t)| \psi_n\rangle = \langle \psi_m| \psi_n\rangle - \frac{i}{\hbar}\int_0^t dt_1 \langle \psi_m |H(t_1)| \psi_n\rangle \qquad (3.29)
$$

を計算すればよい。

$$
\begin{aligned}
\langle \psi_m |H(t_1)| \psi_n\rangle &= \left\langle \psi_m \left| e^{iH_0t_1/\hbar} H_I(0) e^{-iH_0t_1/\hbar} \right| \psi_m \right\rangle \\
&= \left\langle \psi_m e^{iE_mt_1/\hbar} \right| H_I(0) \left| e^{-iE_nt_1/\hbar}\psi_m \right\rangle \\
&= e^{i(E_m-E_n)t/\hbar} H_{mn} \quad (H_{mn} = \langle \psi_m |H_I(0)| \psi_n\rangle) \qquad (3.30)
\end{aligned}
$$

(3.30) を (3.29) に入れると

$$
\begin{aligned}
\langle \psi_m |U(t)| \psi_n\rangle &= \delta_{mn} - \frac{i}{\hbar}\int_0^t dte^{-i(E_m-E_n)t/\hbar} H_{mn} \\
&= \delta_{mn} - \frac{H_{mn}}{E_m - E_n}\left(e^{i(E_m-E_n)t/\hbar} - 1\right) \qquad (3.31)
\end{aligned}
$$

右辺の積分は，公式

$$
\int_{-L}^{L} e^{ikx} dk = \frac{e^{iLx} - e^{-iLx}}{ix}
$$

を使った。$m \neq n$ の状態に対して

$$
\begin{aligned}
|C_m(t)|^2 &= \left| -\frac{H_{mn}}{E_m - E_n}\left(e^{i(E_m-E_n)t/\hbar} - 1\right)\right|^2 = \left|\frac{H_{mn}}{\hbar\omega}\right|^2 \left|e^{i\omega t} - 1\right|^2 \\
&= \left|\frac{H_{mn}}{\hbar\omega}\right|^2 (e^{i\omega t} - 1)(e^{-i\omega t} - 1) = 2\left|\frac{H_{mn}}{\hbar\omega}\right|^2 (1 - cos\omega t) \\
&= \frac{4}{\hbar^2}|H_{mn}|^2 \frac{sin^2(\omega t/2)}{\omega^2} \qquad (3.32)
\end{aligned}
$$

を得る。ただし，$\omega = (E_m - E_n)/\hbar$ とした。
ここで，公式

$$
\frac{sin^2(\omega t/2)}{\omega^2} \xrightarrow{t\to\infty} \frac{\pi t}{2}\delta(\omega) \qquad (3.33)
$$

を使うと

$$
w_{mn} = \frac{|C_M(t)|^2}{t} = \frac{2\pi}{\hbar}|H_{mn}|^2 \delta(E_m - E_n) \qquad (3.34)
$$

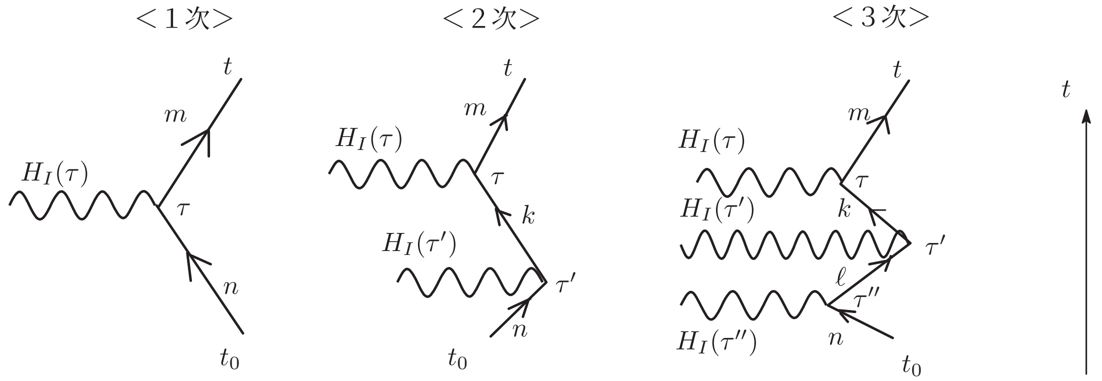
が得られる。右辺は単位時間当たりの遷移確率を与える。これは状態 m と n は相異なった状態であるが，両者のエネルギーが等しいときにのみ遷移が起こることを示している。(3.33) はフェルミの黄金律と呼ばれている。

♣ *Q&A* ———

- キャサリン：相互作用表示の相当詳細なところにまで話が進んだわね。
- K 氏：そうだね，このあたりの話は場の量子論を勉強するとき役立つと思ってついリキが入ってしまった。
- キャサリン：摂動の計算で，高次の項となると計算が大変ね。

[4]初期状態で系は C_n の状態にいる。

- K 氏：そうだね，まともにやろうとしたら一発で挫折するね (汗 ;; 。ところがファインマン図形の方法というのがあって，実際の計算はそれを使ってやる。楽に計算できる優れもんなんだ。
- キャサリン：そうなんだ。ファインマン図というのはときときモノの本なんかで見かけるけど，いまの摂動展開をファインマン図で描くとどうなるのかしら。
- K 氏：そうだね，メシアの量子力学 (3) に下のダイアグラムが載っていたので参考までに載せておくよ。
- キャサリン：Wick の T 積というのを使うと，$U(t)$ は形式的に (??) のように exp の展開と同じ様にかけるのね。ところで (3.17) で
$$i\hbar\frac{d}{dt}U(t) = H_{int}(t)U(t)$$
を $U(0) = 1$ という初期条件のもとに形式的に解くと
$$U(t) = exp\left\{-\frac{i}{\hbar}\int_0^t dt' H_{int}(t')\right\}$$
が得られるけど，何もここまで遠回りしなくてもよかったのじゃないかしら。
- K 氏：うん，形式的には同じだけど，(??) は T 積で時間順序という枠をはめているからより正確な表記ということになるね。
- キャサリン：今回はずいぶんと盛りだくさんのことが勉強できたわ。あら，外はずいぶん暗くなってきたわね。今日は本当にありがとうございました。少し頭がクラクラするけど，今日のノートを何回も読み返して見るわ。
- K 氏：僕も頭がボ〜っとしてきた。どうだい，うまい生ビールでも飲みにいかないかい。
- キャサリン：そうね，本来なら私が奢らなければいけないけど，あいにく今日は先約があるのよ。またの機会に是非，ということで今日はこれで失礼します。
- K 氏：それは残念だけど仕方がない。それじゃ気をつけていってらっしゃぁ〜い。
- キャサリン：それじゃ失礼しま〜す。



■ n から m への遷移確率のファインマン図

（了）