量子力学　第 12 回　演習解答

以下の問題に答えなさい．ただし，1 次摂動項，2 次摂動項を表す公式は，既知のものとして用いて良い．

問題 1．

2 準位系を考える．無摂動ハミルトニアン $\hat{H}_0$ に対する固有ベクトルを $|\alpha\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, |\beta\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$，エネルギー固有値を $\varepsilon_\alpha^{(0)} = +\varepsilon_0, \varepsilon_\beta^{(0)} = -\varepsilon_0$ とする．ここで 2 準位系に $\hat{H}' = g\hat{\sigma}_x$ で表される摂動が加えられた場合を考える（ε_0, g は正の実定数）．以下の問に答えよ．

ヒント：パウリ行列　$\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$，$\hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$，$\hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$

(1)　$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}'$ に対するエネルギー固有値 $\varepsilon_1, \varepsilon_2 \left(\varepsilon_1 > \varepsilon_2\right)$ を“摂動近似を用いずに”厳密に求めよ．

【解答】

$\hat{H} = \begin{pmatrix} +\varepsilon_0 & g \\ g & -\varepsilon_0 \end{pmatrix}$ であることから，$\hat{H}$ に対するエネルギー固有値を ε とおくと，ε は次の固有値方程式を満たす．

$$\begin{vmatrix} \varepsilon_0 - \varepsilon & g \\ g & -\varepsilon_0 - \varepsilon \end{vmatrix} = 0$$

$$\varepsilon = \pm\sqrt{\varepsilon_0^2 + g^2}$$

したがって，

$$\varepsilon_1 = +\sqrt{\varepsilon_0^2 + g^2}$$

$$\varepsilon_2 = -\sqrt{\varepsilon_0^2 + g^2}$$

と求められる（$\varepsilon_1 > \varepsilon_2$）．

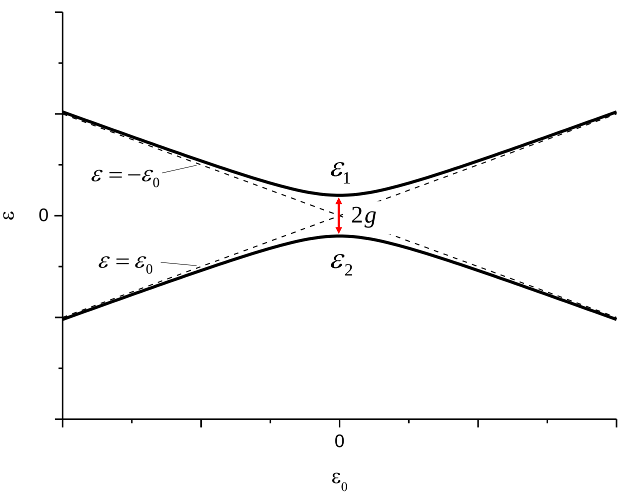

図 1　$\varepsilon_1, \varepsilon_2$ の ε_0 依存性

$\varepsilon_1, \varepsilon_2$ を ε_0 の関数としてグラフに示すと図 1 のようになる．

（注釈）エネルギーの近接した 2 つの準位間に相互作用が働く場合には，お互いに反発するように固有状態を形成する．これを 2 準位間の反交差（anti-crossing）といい，相互作用エネルギー g が大きい程，反交差の大きさは大きくなる．

(2) $\varepsilon_0 >> g$ と仮定すると，縮退のない場合の摂動論が使える．摂動近似を用いて $|\alpha\rangle, |\beta\rangle$ に対するエネルギー固有値の 2 次の摂動近似解 $\varepsilon_\alpha = \varepsilon_\alpha^{(0)} + \varepsilon_\alpha^{(1)} + \varepsilon_\alpha^{(2)}$, $\varepsilon_\beta = \varepsilon_\beta^{(0)} + \varepsilon_\beta^{(1)} + \varepsilon_\beta^{(2)}$ を求めよ．

【解答】

1 次の摂動エネルギー：

$$\varepsilon_\alpha^{(1)} = \langle \alpha | \hat{H}' | \alpha \rangle = \begin{pmatrix} 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & g \\ g & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = 0$$

$$\varepsilon_\beta^{(1)} = \langle \beta | \hat{H}' | \beta \rangle = \begin{pmatrix} 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & g \\ g & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = 0$$

2 次の摂動エネルギー：

$$\langle \alpha | \hat{H}' | \beta \rangle = \begin{pmatrix} 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & g \\ g & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = g$$

$$\langle \beta | \hat{H}' | \alpha \rangle = \begin{pmatrix} 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & g \\ g & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = g$$

であることから，

$$\varepsilon_\alpha^{(2)} = \frac{\left| \langle \alpha | \hat{H}' | \beta \rangle \right|^2}{\varepsilon_\alpha^{(0)} - \varepsilon_\beta^{(0)}} = +\frac{g^2}{2\varepsilon_0}$$

$$\varepsilon_\beta^{(2)} = \frac{\left| \langle \beta | \hat{H}' | \alpha \rangle \right|^2}{\varepsilon_\beta^{(0)} - \varepsilon_\alpha^{(0)}} = -\frac{g^2}{2\varepsilon_0}$$

となる．以上より，エネルギー固有値の 2 次の摂動近似解は，

$$\varepsilon_\alpha = \varepsilon_0 + \frac{g^2}{2\varepsilon_0}$$

$$\varepsilon_\beta = -\left(\varepsilon_0 + \frac{g^2}{2\varepsilon_0} \right) = -\varepsilon_\alpha$$

となる．すなわち，摂動は 2 準位間エネルギー間隔を大きくするように作用する．これにより，2 準位のエネルギーは anticrossing（反交差）を示す．

(3) $\varepsilon_0 >> g$ として，（1）で求めたエネルギー固有値の厳密解をλについて展開し高次の項を無視すると，（2）で求めた摂動近似解に等しくなることを示せ．

【解答】

（1）の結果から，

$$\varepsilon = \pm\sqrt{\varepsilon_0^2 + g^2}$$
$$= \pm\varepsilon_0\sqrt{1+\left(\frac{g}{\varepsilon_0}\right)^2}$$

となる．ここで$\dfrac{g}{\varepsilon_0} << 1$であることから，$\sqrt{1+\left(\dfrac{g}{\varepsilon_0}\right)^2} \cong 1+\dfrac{1}{2}\left(\dfrac{g}{\varepsilon_0}\right)^2$と近似することができる．

したがって，

$$\begin{cases} \varepsilon_1 \cong \varepsilon_0 + \dfrac{g^2}{2\varepsilon_0} \\ \varepsilon_2 \cong -\left(\varepsilon_0 + \dfrac{g^2}{2\varepsilon_0}\right) \end{cases}$$

となり，（2）で求めた 2 次の摂動近似解に等しくなる．