

フェルミの黄金律を理解しよう： 物工実験（初貝），2002

平成14年9月17日版

目次

1	フェルミの黄金律	2
2	時間発展とフェルミの黄金律	4
2.1	基底関数	4
2.2	無次元化とその形式解	4
2.3	フェルミの黄金律の成立条件	5
3	遷移確率を具体的に計算しよう	7
3.1	正確な数値解の構成	7
3.2	行列の対角化のプログラム例	7
3.3	課題	8
4	解答例	13

1 フェルミの黄金律

ここで摂動論による状態の遷移確率に関するフェルミの黄金律を復習しておこう。まず非摂動系とその状態

$$H_0|n\rangle = E_n|n\rangle$$

を考え全系が (時間に依存しない) ハミルトニアン

$$H = H_0 + H_{int}$$

に支配されているとする。このとき時間 0 に状態が非摂動状態 a にあったとして単位時間あたりに非摂動状態 b へ遷移する確率を求めよう。ただし摂動項は十分小さく、更に観測時間は十分長いことを仮定する。

- 相互作用表示

シュレディンガー方程式

$$i\hbar\partial_t|\Psi\rangle = (H_0 + H_{int})|\Psi\rangle$$

において

$$\Psi = e^{-iH_0t/\hbar}\Psi^I$$

とすると¹

$$\begin{aligned} i\hbar\partial_t|\Psi\rangle^I &= H_{int}^I|\Psi\rangle^I \\ H_{int}^I &= e^{iH_0t/\hbar}H_{int}e^{-iH_0t/\hbar} \end{aligned}$$

これを相互作用表示という。よって

$$|\Psi\rangle^I(t) = \sum_n c_n(t)|n\rangle$$

とすれば

$$\begin{aligned} i\hbar\dot{c}_n &= \sum_m \langle n|H_{int}^I|m\rangle c_m \\ &= \sum_m \langle n|H_{int}|m\rangle e^{i(E_n-E_m)t/\hbar} c_m \end{aligned}$$

なおこれより確率の保存

$$\frac{d}{dt} \sum_n |c_n(t)|^2 = 0$$

はすぐに導ける。

¹代入せよ

もとに戻り

$$c_a(t=0) = 1, \quad c_n(t=0) = 0, \quad (n \neq a)$$

として時間が初期条件からあまりたっていないと仮定し逐次近似解を求めると²

$$c_b(t) = \langle b|H_{int}|a\rangle \frac{e^{i(E_b-E_a)t/\hbar} - 1}{E_b - E_a}$$

よって

$$|c_b(t)|^2 = |\langle b|H_{int}|a\rangle|^2 2 \frac{1 - \cos(E_b - E_a)t/\hbar}{(E_b - E_a)^2}$$

ここで^{3 4}

$$\delta(x) = \lim_{\alpha \rightarrow \infty} \frac{1 - \cos \alpha x}{\pi \alpha x^2}$$

をもちいると単位時間に a から b に遷移する確率 $w_{a \rightarrow b}$ が以下のように与えられることを意味する。⁵

$$w_{a \rightarrow b} = \frac{1}{t} |c_b(t)|^2 \longrightarrow \frac{2\pi}{\hbar} |\langle b|H_{int}|a\rangle|^2 \delta(E_b - E_a)$$

つまり遷移はエネルギーは等しいが状態のことなるものあいだで起こる。さらに例えば終状態 b が連続スペクトルに属する場合エネルギー間隔 dE_b における状態密度が $\rho(E_b)$ であるとすれば状態数は $\rho(E_b)dE_b$ なので遷移確率は

$$\int w_{a \rightarrow b} \rho(E_b) dE_b = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle b|H_{int}|a\rangle|^2 \rho(E_a)$$

となる。これをフェルミの黄金律という。

2

$$i\hbar \dot{c}_b(t) = -\langle b|H_{int}|a\rangle e^{i(E_b-E_a)t/\hbar} c_a$$

³これより逐次近似の有効範囲は

$$|\langle b|H_{int}|a\rangle| \ll |E_b - E_a|$$

であり時間にはよらないことがわかる。

4

$$\int_{-\infty}^{\infty} dy \frac{1 - \cos \alpha x}{y^2} = \pi$$

⁵このデルタ関数での置き換えは

$$\frac{|E_a - E_b|t}{\hbar} \gg 1$$

で正当化される。つまりエネルギーが近い状態ほど観測時間が十分に長くなければならない。

2 時間発展とフェルミの黄金律

2.1 基底関数

$|1\rangle, |2\rangle, \dots, |N\rangle$ から成る N 状態系を考えよう。これらはハミルトニアン H_0 の縮退のない固有状態でそのエネルギーが

$$H_0|n\rangle = E_n|n\rangle$$

であるとする。このとき摂動ハミルトニアン H_{int} を含む全ハミルトニアン

$$H = H_0 + H_{int}$$

に従うシュレディンガー方程式

$$i\hbar\partial_t|\Psi(t)\rangle = H|\Psi(t)\rangle$$

をこの基底で解こう。つまり

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_n C_n(t)|n\rangle$$

と書いたときの $C_n(t)$ を求めよう。ただし初期状態は

$$C_a(0) = 1, \quad C_b(0) = 0, b \neq a$$

とする。

この係数 C_n の満たす方程式は代入して $|n\rangle$ と内積をとって

$$i\hbar\dot{C}_n = \sum_m \langle n|H|m\rangle C_m$$

となる。

2.2 無次元化とその形式解

実際の観測をおこなう時間を T としてエネルギーを

$$E_n = \bar{E}_n \cdot (\hbar/T)$$

と書こう。つまり \bar{E}_n は無次元量である。この基底で非摂動ハミルトニアン行列はつぎのように書ける

$$\begin{aligned} \mathbf{H}_0 &= \mathbf{\bar{H}}_0 \cdot (\hbar/T) \\ \mathbf{\bar{H}}_0 &= \text{diag}(\bar{E}_1, \dots, \bar{E}_N), \quad \text{対角行列} \end{aligned}$$

また摂動ハミルトニアン H_{int} のこの基底による行列要素を無次元化してつぎのように書く

$$\langle n|H_{int}|m\rangle = \bar{H}_{nm} \cdot (\hbar/T)$$

ただし $H_{nn} = 0$ としよう。

この設定下で $C_n(t)$ から成るベクトル

$$\mathbf{C}(t) = \begin{pmatrix} C_1(t) \\ \cdots \\ C_N(t) \end{pmatrix}$$

はつぎの微分方程式を満たす。

$$i\hbar\partial_t\mathbf{C}(t) = \bar{\mathbf{H}}\mathbf{C}(t) \cdot (\hbar/T)$$

$$\bar{\mathbf{H}} = \begin{pmatrix} E_1 & H_{12} & H_{13} & \cdots & H_{1N} \\ H_{21} & E_2 & H_{23} & \cdots & H_{2N} \\ H_{31} & H_{32} & E_3 & \cdots & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ H_{N1} & H_{N2} & \cdots & H_{NN-1} & E_N \end{pmatrix}$$

なおハミルトニアンのエルミート性より $\bar{\mathbf{H}}$ はエルミートである。この解は行列の指数関数を用いてつぎのように書ける

$$\mathbf{C}(t) = \mathbf{U}(t)\mathbf{C}(0) = \begin{pmatrix} U_{1a}(t) \\ U_{2a}(t) \\ \vdots \\ U_{N-1a}(t) \\ U_{Na}(t) \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{U}(t) = e^{-i\bar{\mathbf{H}} \cdot (t/T)}$$

2.3 フェルミの黄金律の成立条件

以上の準備のもとでフェルミの黄金律の成立条件を考えよう。まず逐次近似の正当化のために

$$\Delta \ll |\bar{E}_i - \bar{E}_j|, \quad i \neq j$$

が必要でこのとき $a \rightarrow b$ への単位時間当たりの遷移確率は

$$w_{a \rightarrow b} = \frac{|c_b(t)|^2}{t} = \frac{1}{t} |\langle b|H_{int}|a\rangle|^2 2 \frac{1 - \cos(\bar{E}_b - \bar{E}_a) \frac{t}{T}}{(\bar{E}_b - \bar{E}_a)^2 (\frac{\hbar}{T})^2}$$

$$= \frac{|\bar{H}_{ba}|^2}{T} 2 \frac{1 - \cos(\bar{E}_b - \bar{E}_a) \frac{t}{T}}{(\bar{E}_b - \bar{E}_a)^2 (\frac{t}{T})}$$

となる。ここで

$$\frac{t}{T} \gg 1$$

であれば

$$\alpha = \frac{t}{T}$$

として

$$\delta(x) = \lim_{\alpha \rightarrow \infty} \frac{1 - \cos \alpha x}{\pi \alpha x^2}$$

を使って

$$w_{a \rightarrow b} = 2\pi \frac{|\bar{H}_{ba}|^2}{T} \delta(\bar{E}_b - \bar{E}_a)$$

となる。

ただしこの表式によるデルタ関数が作用するのは $\alpha x \ll 1$ である x に対してであるから $\alpha = t/T$, $x = \bar{E}_b - \bar{E}_a$ に注意して

$$\frac{t}{T} \ll \frac{1}{\bar{E}_b - \bar{E}_a} \ll \frac{1}{\Delta}$$

つまり

$$1 \ll \frac{t}{T} \ll \frac{1}{\Delta}$$

この時間領域でフェルミの黄金律が正当化されることとなる。

3 遷移確率を具体的に計算しよう

3.1 正確な数値解の構成

前節の議論に従い \bar{E}_n と \bar{H}_{ij} と時間 t/T とを入力とし $C(t)$ を求めるプログラムを書こう。

ただし初期状態をしめす $a = 1$ とし非摂動状態のエネルギーとしては

$$\bar{E}_n = \text{escale} * n * (-1)^{n-1}$$

とせよ。また遷移行列要素は全て等しく

$$\bar{H}_{ij} = \Delta, (i \neq j)$$

と仮定する。このとき前節の議論に従い正確な波動関数、つまり C_n を計算しつぎにこの結果を使って

$$w_{a \rightarrow b}$$

を数値的に評価しフェルミの黄金律の成立を確認する。

これを順に行おう。

3.2 行列の対角化のプログラム例

数値計算を具体的に実行するための例として行列の対角化を取り上げよう。

まず幾つかのパラメータを読み込み前節で説明したハミルトニアン行列をつくりそれを対角化するプログラム例を示す。

つぎの main.f と入力ファイル input-d.dat を準備した後、次の makefile と calvgd.f がある directory で

```
% make diag
```

としエラーがなければ実行は

```
% diag
```

で行う。

3.3 課題

- 1 前節に掲げたプログラムを理解し自分でコンパイル並びに実行してみよ。
- 2 前節に掲げたプログラムでの入力のほかに t/T の最大値並びに区間 $0 \rightarrow t/T$ の分割数を入力とし $C_n(t)$ ($n = 1, 2, 3, \dots$, $E_1 = 0, E_2 = -escale, E_3 = 2escale$) を計算するプログラムを書きグラフ化せよ。
- 3 前問で計算した $C_n(t)$ を逐次近似の結果と比較せよ。
- 4 α を随時大きくしながら次の関数のグラフを書きその振舞を議論せよ。

$$\delta_\alpha(x) = \frac{1 - \cos \alpha x}{\pi \alpha x^2}$$

- 5 フェルミの黄金律を数値的に確認せよ。（遷移確率が終状態のエネルギーに関してデルタ関数的にふるまうことを確認すればよいとする。）

具体的なパラメータとしては

100 :n, 全準位数

1000. :rtime, t/T の最大値

100 :ntime, 時間の分割数

0.001 :escale

0.01 :deltar, 非対角行列要素の絶対値

0.2 :deltaa, 非対角行列要素の偏角

を用い [3] では $n=2,3,5$ で比較してみよ。

参考までに3次元プロットを作る例をあげる。

次の `threed.gp` を準備した後

を行うと `threed.ps` ができ、これは

で表示でき、

でプリントできる。ただし `other.dat` には2次元メッシュ上の高さのデータが例のように格納されているとする。

```
//maind.f
      program maind
c
      implicit real*8(a-h,o-y)
      implicit complex*16(z) ! Fortran では暗黙の型宣言を使おう。
c
      parameter(ysize=500) ! 扱える行列の最大の次元
      parameter(lda=ysize)
      dimension zhmat(lda,lda)
      !ハミルトニアン行列を格納する配列、固有ベクトルの格納にも使
う
      dimension eig(lda) ! 固有値を格納する配列
c
      open(unit=10,file="input-d.dat",status='unknown')!入力データ
      open(unit=30,file="output.dat",status='unknown')!出力データ
c
c      input
      zai=(0.0d0,1.0d0) !虚数単位
      pi=4.0d0*datan(1.0d0) ! 円周率
c
      read(10,*)nsize ! 行列サイズ
      read(10,*)escale ! escale
      read(10,*)deltar ! delta の絶対値
      read(10,*)deltaa ! delta の偏角を pi 単位で
c
      write(6,*)'nsize =',nsize
      write(6,*)'escale=',escale
      write(6,*)'deltar=',deltar
      write(6,*)'deltaa=',deltaa
c
      zdelta = escale*exp( zai* pi * deltaa ) * deltar
c
      do i=1,nsize !ハミルトニアン行列を設定する
         zhmat(i,i)=escale*dfloat(i-1)*(-1)**(i+1)
         do j=1,i-1
            zhmat(i,j)=zdelta
            zhmat(j,i)=conjg(zdelta)
         enddo
      enddo
//続く
```

```
//続き
      n=nsize
c
c      ! ハミルトニアン行列を対角化する
c
      call calvgd(zhmat,n,lda,eig)
c
c      ! eig(i) 小さいほうから i 番目の固有値
c      ! zhmat(j,i) i 番目の固有値の j 番目の固有ベクトル
c
      do ie=1,nsiz
        write(30,*)ie,eig(ie) ! output.dat に書き出す
        s=0.0
        do i=1,nsiz ! 念のため固有ベクトルが規格化されていることを確
認
          s=s+abs(zhmat(i,ie))**2
        enddo
        write(6,*)ie,s
      enddo
c
      stop
      end
```

```
//input-d.dat
100      :n
0.01    :escale
0.1     :deltar
0.2     :deltaa
```

```
//makefile
OBJ-d = maind.o calvgd.o
FFLAGS=-O
LDFLAGS= -L/usr/local/lib -llapack -lblas
FC = g77
diag: $(OBJ-d)
$(FC) $(FFLAGS) $(OBJ-d) -o e-diag $(LDFLAGS)
clean:
\rm *.o *~ fort.* e-diag a.out core *.ps\
        output.dat *.log *~ \##* rest.dat tra2.dat
```

```
//threed.gp
set term postscript color solid "Times-Roman" 14
set output "threed.ps"
set size 0.8,1.1
set offsets -10
set hidden3d
set contour both
set cntrparam levels 05
set surface
set view 30, 30, 1, 1.0
splot 'other.dat' w lines
```

```
//other.dat
```

```
x1, y_1, z1
x2, y_1, z1
x3, y_1, z1
```

```
x1, y_2, z1
x2, y_2, z1
x3, y_2, z1
```

```
x1, y_3, z1
x2, y_3, z1
x3, y_3, z1
```

4 解答例

directory exec にて

1.

```
% make diag
```

```
% diag
```

2. 3.

```
% make iter
```

```
% fermi-iter
```

```
% gnuplot cn.gp
```

```
% gv cn.ps
```

4.

```
% make
```

```
% fermi
```

```
% gnuplot threed.gp
```

```
% gv threed.ps
```