５章の解答の一部（5.2～5.4 と 5.8 については後で追加します）

5.1

ローレンツモデルの感受率(5.6)の前の係数を 1 と置いた以下で証明すれば十分である．

$$\tilde{\chi}(\omega)=\frac{1}{\omega_0^2-\omega^2-2i\omega\gamma} \tag{1}$$

また，K-K 関係の(3.27)式は，(3.26)式から容易に導かれるので，

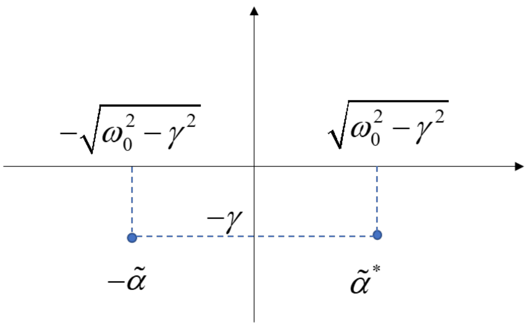
$$\tilde{\chi}(\omega)=-\frac{i}{\pi}P\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\tilde{\chi}(\omega_1)}{\omega_1-\omega}d\omega_1 \tag{3.26}$$

を示せばよい．

まず，(1)は以下のように変形できる．

$$\tilde{\chi}(\omega)=-\frac{1}{(\omega+\tilde{\alpha})(\omega-\tilde{\alpha}^*)} \quad \tilde{\alpha}=\sqrt{\omega_0^2-\gamma^2}+i\gamma \tag{2}$$

$\omega$を複素数とすると，$\omega=-\tilde{\alpha},\tilde{\alpha}^*$が極となるので，$\tilde{\chi}(\omega)$は複素平面の上半面に極がない．




したがって，66 ページの説明がそのまま使えるので，当然 K-K 関係は成立する．これで証明終わりとしても良いが，(3.26)式から逆に戻っていくことで，具体的に示すことにする．

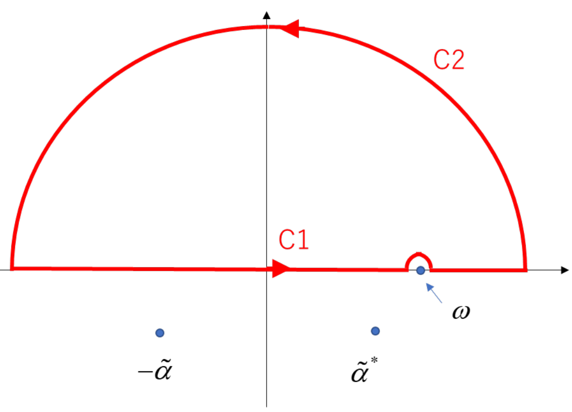
(3.26)式を証明するには，以下を示せばよい．

$$P\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\tilde{\chi}(\omega_1)}{\omega_1-\omega}d\omega_1-i\pi\tilde{\chi}(\omega)=0 \tag{3}$$

この左辺は，(3.25)式の右辺と同じなので，(3)式は複素積分

$$\int\frac{\tilde{\chi}(\tilde{\Omega})}{\tilde{\Omega}-\omega}d\tilde{\Omega} \tag{4}$$

の C1 上での積分がゼロであることを言っている（逆に辿っているので当然だが）．(4)式の被積分関数は上半面に極がないので，C1+C2 の周回積分は以下のようにゼロとなる．



$$\oint_{C_1+C_2} \frac{\tilde{\chi}(\tilde{\Omega})}{\tilde{\Omega}-\omega} d\tilde{\Omega} = 0$$

したがって，C2 上での積分がゼロであることを示せば，C1 上での積分もゼロとなり，(3)式が証明できたことになる．具体的に書き表すと

$$\int_{C2} \frac{\tilde{\chi}(\tilde{\Omega})}{\tilde{\Omega}-\omega} d\tilde{\Omega} = \int_{C2} \frac{-1}{(\tilde{\Omega}-\omega)(\tilde{\Omega}+\tilde{\alpha})(\tilde{\Omega}-\tilde{\alpha}^*)} d\tilde{\Omega}$$

となるので，$\left|\tilde{\Omega}\right| = R$ とすると，被積分関数は$1/R^3$，積分経路は$R$に比例する．したがって，$R \to \infty$ではこの積分はゼロとなる．

以上より，ローレンツモデルの感受率について，(3.26)式は証明された．

5.5

量子力学の摂動論に従って，摂動パラメータ$\lambda$を導入して，ハミルトニアンを

$$H = H_0 + \lambda V$$

と表す. ここで, $H_0$は摂動がないときのハミルトニアンで, $V$ は今の場合(5.33)式である. 摂動があるときの波動関数を

$$\Psi(\boldsymbol{r},t) = \Psi^{(0)}(\boldsymbol{r},t) + \lambda\Psi^{(1)}(\boldsymbol{r},t) + \lambda^2\Psi^{(1)}(\boldsymbol{r},t) + \cdots \tag{1}$$

と展開したときの各項を，$H_0$の固有関数$u_j(\boldsymbol{r})$で展開し,

$$\Psi^{(N)}(r,t) = \sum_j a_j^{(N)} u_j(\boldsymbol{r}) e^{-i\omega_j t} \tag{2}$$

と表してシュレーディンガー方程式

$$i\hbar\frac{\partial\Psi(\boldsymbol{r},t)}{\partial t} = (H_0 + \lambda V)\Psi(\boldsymbol{r},t)$$

に代入する．そして，$\lambda$の同じべきの項を比較することで，係数$a_j^{(N)}$は以下の式に従うことがわかる（一般的な量子力学の教科書，または"Nonlinear Optics"(Boyd)を参照),

$$\dot{a}_j^{(N)}(t) = \frac{1}{i\hbar}\sum_l a_l^{(N-1)}(t)\tilde{V}_{jl}e^{i\omega_{jl}t} \tag{3}$$

ここで，$\tilde{V}_{jl}$は(5.33)式の摂動項 $V$に対する

$$\tilde{V}_{jl} = \langle j|V|l\rangle = -\langle j|\boldsymbol{\mu}|l\rangle\cdot\boldsymbol{E}(t) = -\tilde{\boldsymbol{\mu}}_{jl}\cdot\boldsymbol{E}(t) \tag{4}$$

である.

最初基底状態$u_g$にあったのならば，$a_g^{(0)} = 1, a_{j\neq g}^{(0)} = 0$なので，1 次の係数は

$$\dot{a}_j^{(1)}(t) = \frac{1}{i\hbar}\tilde{V}_{jg}e^{i\omega_j t} \tag{5}$$

となる. ここで, 基底状態をエネルギーの基準にとり, $\omega_g = 0$とした. (5)式を(4)と$\boldsymbol{E}(t)$のフーリエ成分を使って書き直して整理すると,

$$\begin{aligned}\dot{a}_j^{(1)}(t) &= \frac{1}{i\hbar}\tilde{V}_{jg}e^{i\omega_j t} = \frac{1}{i\hbar}\left(-\tilde{\boldsymbol{\mu}}_{jg}\cdot\boldsymbol{E}(t)\right)e^{i\omega_j t} \\ &= \frac{-1}{i\hbar}\tilde{\boldsymbol{\mu}}_{jg}\cdot\left[\frac{1}{2\pi}\int\tilde{\boldsymbol{E}}(\omega)e^{-i\omega t}d\omega\right]e^{i\omega_j t} = \frac{-1}{2\pi i\hbar}\int d\omega\,\tilde{\boldsymbol{\mu}}_{jg}\cdot\tilde{\boldsymbol{E}}(\omega)e^{i(\omega_j-\omega)t}\end{aligned} \qquad (6)$$

となる．(6)式を時刻-∞から t まで積分すれば，$a_j(t)$が求められるが，その際に$\omega_j$の準位の減衰を考慮して，

$$\omega_j \to \omega_j - i\gamma_j \qquad (7)$$

という変換を行っておく．変換を行ったのち，(6)式を時刻-∞から t まで積分すると

$$\begin{aligned}a_j^{(1)}(t) &= \int_{-\infty}^{t}dt\left[\frac{-1}{2\pi i\hbar}\int d\omega\,\tilde{\boldsymbol{\mu}}_{jg}\cdot\tilde{\boldsymbol{E}}(\omega)e^{i(\omega_j-\omega-i\gamma_j)t}\right] \\ &= \frac{1}{2\pi\hbar}\left[\int d\omega\frac{\tilde{\boldsymbol{\mu}}_{jg}\cdot\tilde{\boldsymbol{E}}(\omega)}{\omega_j-\omega-i\gamma_j}e^{i(\omega_j-\omega-i\gamma_j)t}\right]_{-\infty}^{t} = \frac{1}{2\pi\hbar}\int d\omega\frac{\tilde{\boldsymbol{\mu}}_{jg}\cdot\tilde{\boldsymbol{E}}(\omega)}{\omega_j-\omega-i\gamma_j}e^{i(\omega_j-\omega-i\gamma_j)t}\end{aligned} \qquad (8)$$

(7)の変換は，積分において，無限の過去（$t=-\infty$）の影響を無視することにも対応していることがわかる．積分したのち，exp の肩にある$\gamma_j$の項は落とし，最終的に以下を得る．

$$a_j^{(1)}(t) = \frac{1}{2\pi\hbar}\int d\omega\frac{\tilde{\boldsymbol{\mu}}_{jg}\cdot\tilde{\boldsymbol{E}}(\omega)}{\omega_j-\omega-i\gamma_j}e^{i(\omega_j-\omega)t} \qquad (9)$$

exp の肩にある$\gamma_j$の項は落としたのに，分母の$\gamma_j$は残すというのは気持ち悪いと感じるだろうが，この形が正しいことは，密度行列を用いた取り扱いによって明確になる．以上のような$\gamma_j$の導入を，本文中では単に「$\gamma_j$は因果律を満足するように導入されたダンピング因子」と記載している．

以上より，1 次の項は

$$\begin{aligned}\Psi^{(1)}(r,t) &= \sum_j a_j^{(1)}u_j(\boldsymbol{r})e^{-i\omega_j t} \\ &= \frac{1}{2\pi\hbar}\int d\omega\sum_j\frac{\tilde{\boldsymbol{\mu}}_{jg}\cdot\tilde{\boldsymbol{E}}(\omega)}{\omega_j-\omega-i\gamma_j}e^{i(\omega_j-\omega)t}u_j(\boldsymbol{r})e^{-i\omega_j t}\end{aligned} \qquad (10)$$

となり，(5.38)式が証明された．

5.6

振動子強度

$$f_j = \frac{2m\omega_j}{\hbar e^2}\left|\tilde{\boldsymbol{\mu}}_{jg}\right|^2 \tag{5.46}$$

に対して，総和則

$$\sum_j f_j = 1 \tag{5.47}$$

を証明する．ここでも，基底状態をエネルギーの基準にとり，$\omega_g = 0$ としている．さらに，計算を簡単にするために，$x$ 方向の 1 次元で考える（3 次元にしても基本的な流れは同じ）．つまり，$\tilde{\boldsymbol{\mu}}_{jg}$ を

$$\left|\tilde{\mu}_{jg}\right|^2 = \left|\langle j|-ex|g\rangle\right|^2 = e^2\left|\langle j|x|g\rangle\right|^2 = e^2\left|\tilde{x}_{jg}\right|^2 \tag{1}$$

として，

$$\sum_j \frac{2m\omega_j}{\hbar e^2}e^2\left|\langle j|x|g\rangle\right|^2 = \sum_j \frac{2m\omega_j}{\hbar}\left|\langle j|x|g\rangle\right|^2 = 1 \tag{2}$$

を証明する．

量子力学による以下の 3 つを用いる．

1. $H_0$ の固有関数 $u_j$ は完全系をなす：$\sum_j |j\rangle\langle j| = 1$ （3）
2. $p_x$ と $x$ の交換関係：$[p_x, x] = p_x x - x p_x = -i\hbar$ （4）
3. 公式（証明はあとにつける）

$$\langle j|p_x|g\rangle = im\omega_j\langle j|x|g\rangle \quad (\omega_g = 0 \text{ としている}) \tag{5}$$

上の 3 つを用いて，(2)を証明する．(4)より

$$\begin{aligned}-i\hbar &= \langle g|-i\hbar|g\rangle = \langle g|[p_x, x]|g\rangle \\ &= \langle g|p_x x|g\rangle - \langle g|x p_x|g\rangle\end{aligned}$$

(3)を用いて

$$=\langle g|p_x\left(\sum_j |j\rangle\langle j|\right)x|g\rangle-\langle g|x\left(\sum_j |j\rangle\langle j|\right)p_x|g\rangle$$
$$=\sum_j\left[\langle g|p_x|j\rangle\langle j|x|g\rangle-\langle g|x|j\rangle\langle j|p_x|g\rangle\right]$$

さらに，(4)を用いて

$$=\sum_j\left[-im\omega_j\langle g|x|j\rangle\langle j|x|g\rangle-\langle g|x|j\rangle im\omega_j\langle j|x|g\rangle\right]$$
$$=\sum_j\left[-2im\omega_j\left|\langle j|x|g\rangle\right|^2\right]$$

したがって，

$$-i\hbar=\sum_j\left[-2im\omega_j\left|\langle j|x|g\rangle\right|^2\right] \tag{6}$$

となり，(2)が証明された．

公式(5)の証明．

(4)より，

$$p_x\left[p_x,x\right]=p_x^2x-p_xxp_x=-i\hbar p_x \tag{7}$$

$$\left[p_x,x\right]p_x=p_xxp_x-xp_x^2=-i\hbar p_x \tag{8}$$

(7)+(8)より

$$p_x^2x-xp_x^2=\left[p_x^2,x\right]=-2i\hbar p_x \tag{9}$$

が導かれるので，ハミルトニアン

$$H_0=\frac{1}{2m}p_x^2+V\left(x\right) \tag{10}$$

と $x$ の交換関係は

$$\left[H_0,x\right]=-\frac{i\hbar}{m}p_x \tag{11}$$

となる．

また，

$$\begin{aligned}\langle j|[H_0,x]|g\rangle &= \langle j|H_0x - xH_0|g\rangle \\ &= \hbar\omega_j\langle j|x|g\rangle - \hbar\omega_g\langle j|x|g\rangle = \hbar\omega_j\langle j|x|g\rangle\end{aligned} \tag{12}$$

なので，(11)と(12)より

$$\langle j|-\frac{i\hbar}{m}p_x|g\rangle = \hbar\omega_j\langle j|x|g\rangle$$ となり，(5)式が証明された．

5.7

水素原子の 1s → 2p 遷移の振動子強度

$$f_{2p} = \frac{2m\omega_{2p}}{\hbar e^2}\left|\tilde{\boldsymbol{\mu}}_{2pg}\right|^2$$

を求める．

光の偏光方向（電場の方向）を z 方向とする．

$$\Psi_{1s} = \frac{1}{\sqrt{\pi}}\left(\frac{1}{a_B}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{r}{a_B}} \tag{1}$$

$$\Psi_{2p_z} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}}\left(\frac{1}{a_B}\right)^{\frac{3}{2}} \frac{r}{a_B} e^{-\frac{r}{2a_B}} \cos\theta \tag{2}$$

なので，

$$\left\langle 2p_z \middle| z \middle| 1s \right\rangle = \frac{1}{4\sqrt{2}\pi}\left(\frac{1}{a_B}\right)^4 \int zr\cos\theta e^{-\frac{3r}{2a_B}} dV \tag{3}$$

$z = r\cos\theta$ なので，(3)式の積分部分は

$$\iiint dr\left(rd\theta\right)\left(r\sin\theta d\varphi\right) r^2\cos^2\theta e^{-\frac{3r}{2a_B}}$$

$$= 2\pi\int_0^\infty r^4 e^{-\frac{3r}{2a_B}} dr \int_0^\pi \cos^2\theta\sin\theta d\theta = \frac{2^{10}}{3^5}\pi a_B^5$$

となる（最後の r の積分は公式を用いた）．したがって，

$$\left\langle 2p_z \middle| z \middle| 1s \right\rangle = \frac{1}{4\sqrt{2}\pi}\left(\frac{1}{a_B}\right)^4 \frac{2^{10}}{3^5}\pi a_B^5 = \frac{2^8}{3^5\sqrt{2}} a_B = 0.745 a_B \tag{4}$$

となり，振動子強度の式に代入して以下となる．

$$f_{2p_z} = \frac{2m\omega_{2p}}{\hbar e^2}\left| -e\left\langle 2p_z \middle| z \middle| 1s \right\rangle \right|^2 = \frac{2m\omega_{2p}}{\hbar}\left(0.745 a_B\right)^2 \tag{5}$$

あとは，以下の数値を代入して， $f_{2p_z} = 0.42$ を得る．

$$a_B = 5.3\times10^{-11}\ \mathrm{m} \qquad \omega_{2p} = 1.55\times10^{16}\ \mathrm{s^{-1}}$$

$$\hbar = 1.05\times10^{-34}\ \mathrm{J\cdot s} \qquad m = 9.1\times10^{-31}\ \mathrm{kg}$$