

量子力学 II 演習問題 8

2019 年 6 月 19 日

1 Wigner-Eckart の定理

1.1

軌道角運動量演算子 \hat{L}_i ($i = x, y, z$) は空間回転の生成子である。z 軸周りの角度 θ の回転 $e^{-i\frac{\hat{L}_z}{\hbar}\theta}$ 下での位置演算子 $(\hat{x}, \hat{y}, \hat{z})$ の変換則を求めよ。

1.2

$(\hat{x}, \hat{y}, \hat{z})$ の線型結合を取り直して、

$$\hat{x}_{\pm 1} := \mp \frac{\hat{x} \pm i\hat{y}}{\sqrt{2}}, \quad \hat{x}_0 := \hat{z} \quad (1.1)$$

と定義する。 $\hat{x}_{\pm 1}$ と \hat{x}_0 の z 軸周りの角度 θ の回転 $e^{-i\frac{\hat{L}_z}{\hbar}\theta}$ の下での変換則を求めよ。^{*1}

1.3

昇降演算子は $\hat{L}_{\pm} := \hat{L}_x \pm i\hat{L}_y$ と定義される。 $\hat{x}_{\pm 1}, \hat{x}_0$ と \hat{L}_{\pm}, \hat{L}_z との交換関係を求めよ。

^{*1} ヒント：ケット $\hat{S}|\psi\rangle$ を \hat{U} で座標変換すると、 $\hat{U}\hat{S}|\psi\rangle = (\hat{U}\hat{S}\hat{U}^{-1})\hat{U}|\psi\rangle$ となる。したがって、 \hat{U} による座標変換のもとで、演算子 \hat{S} は $\hat{U}\hat{S}\hat{U}^{-1}$ へと変換する。

1.4

一般に、全角運動量演算子 \hat{J}_i ($i = x, y, z$) に対して交換関係

$$[\hat{J}_\pm, \hat{A}_q^{(k)}] = \hbar\sqrt{(k \mp q)(k \pm q + 1)}\hat{A}_{q\pm 1}^{(k)}, \quad [\hat{J}_z, \hat{A}_q^{(k)}] = \hbar q\hat{A}_q^{(k)} \quad (1.2)$$

を満たす演算子 $\hat{A}_q^{(k)}$ ($q = -k, \dots, k$) を階数 k の球面テンソル演算子という。ここで、 $\hat{J}_\pm = \hat{J}_x \pm i\hat{J}_y$ である。

$\hat{J}^2|\alpha jm\rangle = \hbar^2 j(j+1)|\alpha jm\rangle$ および $\hat{J}_z|\alpha jm\rangle = \hbar m|\alpha jm\rangle$ を満たす状態 $|\alpha jm\rangle$ に対して、

$$\langle \alpha' j' m' | [\hat{J}_\pm, \hat{A}_q^{(k)}] | \alpha jm \rangle \quad (1.3)$$

を計算することにより、Wigner-Eckart の定理

$$\langle \alpha' j' m' | \hat{A}_q^{(k)} | \alpha jm \rangle = \frac{\langle jm; kq | j' k j'; m' \rangle}{\sqrt{2j+1}} c_{\alpha' \alpha}(\hat{A}_q^{(k)}; j', j) \quad (1.4)$$

を示せ。^{*2}

ここで α は角運動量以外の量子数を表す。 $\langle j' m'; kq | j' k j; m \rangle$ はクレブシュー-ゴルダン係数であり、量子化軸（ここでは z 軸）に対する幾何学的関係によって決まる因子である。 $c_{\alpha' \alpha}(\hat{A}_q^{(k)}; j', j)$ は $\hat{A}_q^{(k)}$ の性質を反映する因子であり、系の向きに関する要素 m, m', q に依存しない。

2 Wigner-Eckart の定理の応用

2.1

中心力ポテンシャルによって束縛されたスピン 0 の粒子を考える。このとき、Wigner-Eckart の定理を用いることで行列要素

$$\langle n' l' m' | \hat{x} \pm i\hat{y} | n l m \rangle \quad (2.1)$$

を $\langle n' l' m' | \hat{z} | n l m \rangle$ を用いて表せ。ここに現れた 3 つの量について、行列要素が 0 にならないのはどんなときか。

^{*2} ヒント：式 (1.3) とクレブシュー-ゴルダン係数に対する漸化式とを比較せよ。

2.2

2つのベクトル演算子 $(\hat{U}_x, \hat{U}_y, \hat{U}_z)$ と $(\hat{V}_x, \hat{V}_y, \hat{V}_z)$ から、階数2の球面テンソル演算子 $\hat{T}_i^{(2)}$ ($i = 0, \pm 1, \pm 2$) を作れ。

2.3

階数2の球面テンソル演算子の成分を用いて、 $\hat{x}\hat{y}$, $\hat{x}\hat{z}$ および $\hat{x}^2 - \hat{y}^2$ を表せ。

2.4

四重極モーメントは

$$Q := e \langle \alpha, j, m = j | 3\hat{z}^2 - \hat{r}^2 | \alpha, j, m = j \rangle, \quad \hat{r}^2 = \hat{x}^2 + \hat{y}^2 + \hat{z}^2 \quad (2.2)$$

で定義される。Q とクレブシュ-ゴルダン係数を用いて

$$e \langle \alpha, j, m' | (\hat{x}^2 - \hat{y}^2) | \alpha, j, m = j \rangle \quad (2.3)$$

を計算せよ。ここで $m' = -j, -j+1, \dots, j-1, j$ である。

3 水素原子の昇降演算子

水素原子の動径方向のシュレーディンガー方程式は

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2mr} \frac{d^2}{dr^2} r + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) R_l(r) = E_l R_l(r) \quad (3.1)$$

である。 $R_l(r)$ は動径方向の波動関数である。

3.1

$R_l(r) = \chi_l(r)/r$ としたとき、(3.1) が $\hat{H}_l \chi_l(r) = \frac{2mE_l}{\hbar^2} \chi_l(r)$ と書き直されたとする。このとき、 \hat{H}_l を求めよ。

3.2

演算子

$$\hat{a}_l := \frac{d}{dr} + \frac{l}{r} - \frac{m}{\hbar^2 l} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right), \quad (l \geq 1) \quad (3.2)$$

を定義する。このとき、 $\hat{H}_l = \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_l + c_l$ と書けることを確認し、 c_l を求めよ。

3.3

交換関係 $[\hat{a}_l, \hat{a}_l^\dagger]$ を計算し、さらに $[\hat{H}_l, \hat{a}_l]$ と $[\hat{H}_l, \hat{a}_l^\dagger]$ を計算せよ。

3.4

等式 $\hat{a}_{l+1} \hat{a}_{l+1}^\dagger + c_{l+1} = \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_l + c_l$ を示せ。また、それを用いて χ_l が \hat{H}_l の固有状態ならば $\hat{a}_{l+1}^\dagger \chi_l, \hat{a}_l \chi_l$ はそれぞれ $\hat{H}_{l+1}, \hat{H}_{l-1}$ の固有状態であることを示せ。

3.5

任意の l について $\hat{a}_{l+1}^\dagger \chi_l = 0$ となる χ_l を求めよ。また、そのような χ_l の存在を用いて、水素原子のエネルギー固有値とその縮退度を求め、講義ノートの結果と一致することを確かめよ。