量子力学 II（上田正仁）　期末試験

2018 年 7 月 24 日　10:25 - 12:10 (105 分)

全体的な注意

- 問題 1 から問題 5 までのすべてに解答せよ。問題に不備があると思われる場合は、問題のどの点をどのように修正、あるいは解釈したかを明記した上で、その修正、解釈のもとで解答せよ。
- 解答用紙は 2 枚である。そのうち、1 枚については表面に問題 1 と問題 2、裏面に問題 3 の解答を記述し、もう 1 枚については表面に問題 4、裏面に問題 5 の解答を記述せよ。
- 遅刻は試験開始後 30 分まで認められる。試験開始後 30 分以降であれば、答案を提出して退室してよい。

問題 1

この問題によって成績評価が左右されることはありません。

(1) 講義ノートと演習問題について、誤りや改善点などがあれば指摘してください。

(2) 授業や演習問題について、要望や改善点など、率直な意見を述べてください。

問題 2　Stark 効果

一様な電場中に置かれた水素原子を考える。但し、電子のスピン自由度は考えない。このとき、ハミルトニアンは次のように与えられる。

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}, \quad \hat{H}_0 = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} - \frac{\alpha\hbar c}{r}, \quad \hat{V} = eEz = eEr\cos\theta$$

ここで、$\alpha := \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar c}$ は微細構造定数、m は電子の質量、$-e$ は電子の電荷、r は電子の原子中心からの距離、z は電子の z 座標である。但し、電場は大きさ E で z 軸の正の向きに印加されている。$\hat{H}_0$ を非摂動ハミルトニアン、$\hat{V}$ を摂動とみなして摂動論を適用する。

はじめに、1s 軌道について考える。非摂動ハミルトニアンの基底状態 $|1s\rangle$ に対応する極座標表示の波動関数は $\psi_{1s}(r,\theta,\phi) = R_{1s}(r)Y_{00}(\theta,\phi) = (2\kappa)^{3/2}2\mathrm{e}^{-2\kappa r}\cdot\frac{1}{\sqrt{4\pi}}$ である。但し、$\kappa := \frac{1}{2a_B}$ であり、$a_B := \frac{\hbar}{mc\alpha}$ は Bohr 半径である。

(1) 1s 軌道について、1 次のエネルギー補正を求めよ。

次に、2s, 2p 軌道について考える。非摂動ハミルトニアンの固有状態のうち、4 重縮退した第 1 励起状態を $|2s\rangle, |2p,m\rangle$ $(m=-1,0,1)$ とすると、それぞれに対応した極座標の波動関数は次のようになる。

$$\psi_{2s}(r,\theta,\phi) := \langle\mathbf{r}|2s\rangle = R_{2s}(r)Y_{00}(\theta,\phi), \quad \psi_{2p,m}(r,\theta,\phi) := \langle\mathbf{r}|2p,m\rangle = R_{2p}(r)Y_{1m}(\theta,\phi)$$

$$R_{2s}(r) = \kappa^{3/2}(2-2\kappa r)\mathrm{e}^{-\kappa r}, \qquad R_{2p}(r) = \kappa^{3/2}\frac{2\kappa r}{\sqrt{3}}\mathrm{e}^{-\kappa r}$$

$$Y_{00}(\theta,\phi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}, \qquad Y_{10}(\theta,\phi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta, \quad Y_{1\pm1}(\theta,\phi) = \mp\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta\mathrm{e}^{\pm\mathrm{i}\phi}$$

(2) 2s, 2p 軌道について、1 次のエネルギー補正、および対応する 0 次のエネルギー固有状態を求めよ。

問題３　撃力を受ける調和振動子

ハミルトニアンが次のような形で与えられる状況を考える。

$$\hat{H}(t) = \hat{H}_0 + f(t)\hat{V}$$

$\hat{H}_0$ を非摂動ハミルトニアン、$f(t)\hat{V}$ を摂動項とみなして時間に依存する摂動論を適用する。ここで、摂動が $t=0$ 近傍の短時間のみ働く状況を考える。すなわち、十分に小さい正の実数 ϵ に対して、$|t| > \epsilon$ ならば $f(t) = 0$ であるとする。時刻 t における系の状態を $|\psi(t)\rangle$ とする。

(1) ϵ が十分に小さい時、$|\psi(\epsilon)\rangle$ が $|\psi(-\epsilon)\rangle$ を用いて次のように書けることを示せ。

$$|\psi(\epsilon)\rangle = \exp\left[-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\left(\int_{-\infty}^{\infty} f(t')\,\mathrm{d}t'\right)\hat{V}\right]|\psi(-\epsilon)\rangle$$

次に、具体的な状況として、1 次元調和振動子に力積が F_0 である撃力が働く状況を考える。

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}\hat{x}^2, \quad f(t) = \delta(t), \quad \hat{V} = -F_0\hat{x}$$

調和振動子においては、消滅演算子を

$$\hat{a} = \frac{\hat{p}}{\sqrt{2m\hbar\omega}} - \mathrm{i}\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x}$$

と定義すると、基底状態 $|0\rangle$ は $\hat{a}\,|0\rangle = 0$ によって定義され、第 n 励起状態 $|n\rangle$ は $|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}\left(\hat{a}^\dagger\right)^n|0\rangle$ と書くことができる。

(2) $t < 0$ において系が基底状態にあったとき、$t > 0$ においても基底状態にとどまっている確率を求めよ。なお、演算子 $\hat{A}, \hat{B}$ に対して $\left[\hat{A}, \hat{B}\right]$ が定数であるときに成立する、次の恒等式を証明なしに用いてもよい。

$$\mathrm{e}^{\hat{A}+\hat{B}} = \mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\left[\hat{A},\hat{B}\right]}\mathrm{e}^{\hat{A}}\mathrm{e}^{\hat{B}}$$

問題４　準古典近似による調和振動子のエネルギー準位の解析

1 次元空間において、調和振動子型ポテンシャル $U(x) = \frac{1}{2}m\omega^2x^2$ の中を運動する粒子のエネルギー準位を準古典近似によって求めよう。以下では、固有エネルギー E に対応するエネルギー固有状態を考える。このとき、回帰点すなわち $p(x) := \sqrt{2m(E-U(x))} = 0$ の 2 つの解を a, b（但し、$a < b$）とする。

(1) a、b の値を求めよ。

第 1 次近似における準古典的波動関数を考える。$x > b$ における波動関数 $\psi_+(x)$ および $x < a$ における波動関数 $\psi_-(x)$ はそれぞれ次のような形で表される。

$$\psi_+(x) = \frac{c'}{2\sqrt{|p(x)|}}\exp\left(-\frac{1}{\hbar}\left|\int_b^x p(y)dy\right|\right), \quad \psi_-(x) = \frac{c}{2\sqrt{|p(x)|}}\exp\left(-\frac{1}{\hbar}\left|\int_x^a p(y)dy\right|\right)$$

(2) $a < x < b$ における波動関数を $\psi_0(x)$ とする。$x = b$ における接続を考え、$\psi_0(x)$ を、c' を用いて表せ。また、$x = a$ における接続を考え、$\psi_0(x)$ を、c を用いて表せ。但し、必要ならば次の事実を証明なしに用

いてよい。微分方程式 $\frac{\mathrm{d}^2 u(z)}{\mathrm{d}z^2} - zu(z) = 0$ は 2 つの独立解 $\mathrm{Ai}(z)$ と $\mathrm{Bi}(z)$ を持ち、これらの関数は $z \to -\infty$ において次のような漸近形を持つ。

$$\mathrm{Ai}(z) \approx \frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{1}{|z|^{1/4}} \cos\left(\frac{2}{3}|z|^{3/2} - \frac{\pi}{4}\right), \quad \mathrm{Bi}(z) \approx -\frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{1}{|z|^{1/4}} \sin\left(\frac{2}{3}|z|^{3/2} - \frac{\pi}{4}\right)$$

また、$z \to +\infty$ において次のような漸近形を持つ。

$$\mathrm{Ai}(z) \approx \frac{1}{2\sqrt{\pi} z^{1/4}} \exp\left(-\frac{2}{3} z^{3/2}\right), \quad \mathrm{Bi}(z) \approx \frac{1}{\sqrt{\pi} z^{1/4}} \exp\left(+\frac{2}{3} z^{3/2}\right)$$

(3) (2) で求めた $\psi_0(x)$ の 2 通りの表式が $a < x < b$ において一致することを要請することによって固有エネルギー E を求めよ。

問題５　超対称性と固有エネルギーの縮退

本講義においては、系の対称性が保存量やエネルギー準位の縮退と関係している、ということを学んだ。本問題においては、超対称性と呼ばれる対称性を持つ簡単な系について考察しよう。

１次元座標の自由度を持ち、次のような形の二成分波動関数によって状態が表される系を考える。

$$\vec{\psi}(x) := \begin{pmatrix} \psi_1(x) \\ \psi_0(x) \end{pmatrix}$$

二つの状態 $\vec{\phi}(x)$ と $\vec{\psi}(x)$ の内積は次のように定義される。

$$\langle \phi | \psi \rangle := \int_{-\infty}^{\infty} \left(\vec{\phi}(x)^\dagger\right) \vec{\psi}(x)\,\mathrm{d}x = \int_{-\infty}^{\infty} \left(\phi_1^*(x)\psi_1(x) + \phi_0^*(x)\psi_0(x)\right)\mathrm{d}x$$

また、波動関数 $\vec{\psi}(x)$ は $\langle \psi | \psi \rangle = 1$ によって規格化されている。この系のハミルトニアンが次のような形で与えられるとする。

$$H(x) = \begin{pmatrix} H_1(x) & 0 \\ 0 & H_2(x) \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} E & 0 \\ 0 & E \end{pmatrix}, \quad H_1(x) = A^\dagger(x)A(x), \quad H_2(x) = A(x)A^\dagger(x)$$

ここで、A と $A^\dagger$ は x についての一階微分演算子を含む演算子であり、$A^\dagger$ は A のエルミート共役である。両者は一般には交換しないことに注意せよ。また、E は実数の定数である。ここで、二つの演算子 Q と $Q^\dagger$ を次のように導入する。

$$Q = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ A & 0 \end{pmatrix}, \quad Q^\dagger = \begin{pmatrix} 0 & A^\dagger \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

(1) 反交換関係 $\{Q, Q\} = \left\{Q^\dagger, Q^\dagger\right\} = 0$ および $\left\{Q, Q^\dagger\right\} = H - E$ を示せ。

(2) いずれの固有エネルギー ϵ についても $\epsilon \geq E$ が成立することを示せ。

（ヒント）一般の状態についてエネルギー期待値を評価せよ。

(1) で示した代数は超対称代数と呼ばれ、このような代数が成立するとき、系は超対称性を持つ、という。本問題の系においては $[Q, H] = \left[Q^\dagger, H\right] = 0$ および $\left[Q, Q^\dagger\right] \neq 0$ が成立し（ここでは示さなくてよい）、エネルギー準位が一般には縮退することがわかる（全ての準位が縮退するとは限らないことに注意せよ）。以

下では、縮退が起こるための条件や縮退した固有状態の組を求めよう。

行列で定義される次のような演算子 f および $f^\dagger$ を導入する[1]。

$$f = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad f^\dagger = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

これらを用いると、$Q = Af$ および $Q^\dagger = A^\dagger f^\dagger$ が成立する。

(3) H が f および $f^\dagger$ を用いて次のように表されることを示せ。

$$H = \left(Af + A^\dagger f^\dagger\right)^2 + E$$

(4) 交換関係 $\left[f^\dagger f, H\right]$ を計算せよ。

(4) の結果から、$f^\dagger f$ と H は同時固有状態を持つことがわかる[2]。状態 $\vec{\psi}_b(x) := \begin{pmatrix} 0 \\ \psi_b(x) \end{pmatrix}$ が $f^\dagger f$ と H の同時固有状態であるとし、そのエネルギー固有値を ϵ_b とする。なお、$\vec{\psi}_b(x)$ が $f^\dagger f$ の固有値 0 に属する固有状態であることは明らかである（ここでは示さなくてよい）。このとき、$\vec{\psi}_f(x) := A^\dagger f^\dagger \vec{\psi}_b(x)$ で表されるベクトル $\vec{\psi}_f(x)$ を導入する。

(5) 次の 2 つの等式を示せ。

$$H\vec{\psi}_f(x) = \epsilon_b \vec{\psi}_f(x), \quad f^\dagger f \vec{\psi}_f(x) = \vec{\psi}_f(x)$$

(5) の結果から、$\vec{\psi}_f(x) \neq \vec{\mathbf{0}}$ ならば固有エネルギー ϵ_b が縮退することがわかる。

(6) $\vec{\psi}_f(x) \neq \vec{\mathbf{0}}$ が成立するためには $\epsilon_b > E$ が成立する必要があることを示せ。

（ヒント）ベクトル $\vec{\psi}_f(x)$ の大きさを評価せよ。

(問題は以上です)

（以下は、試験問題とは直接関係のない、問題 5 に関するコメントである。）

上の考察により、$f^\dagger f$ の固有値 0 に属する（ボゾン的な）エネルギー固有状態が E よりも大きい固有エネルギーを持つならば $f^\dagger f$ の固有値 1 に属する（フェルミオン的な）状態と固有エネルギーが縮退する。同様の考察により、フェルミオン的なエネルギー固有状態が E よりも大きい固有エネルギーを持つならばボゾン的な状態と固有エネルギーが縮退することがわかる。また、固有エネルギー E を持つエネルギー固有状態の縮退は、上で述べた機構によっては保証されずハミルトニアンの詳細に依存する。

最後に、中間試験の問題 5 との関係について簡単にコメントする。$A = a_l$, $E = c_l$, $H_1 = H_l(r)$, $H_2 = H_{l-1}(r)$ という対応関係によって本問題における議論が適用できる。このような見方をすると、水素原子におけるエネルギー準位の縮退は超対称性とも関係していると解釈できる。

[1] 本講義の履修者の多くは統計力学 I で学習済みだと思われるが、同種粒子からなる多粒子系において二粒子の交換に伴って多体波動関数の位相が変化しない粒子をボゾン、π 変化する粒子をフェルミオンという。f および $f^\dagger$ は反交換関係 $\left\{f, f^\dagger\right\} = 1$, $\{f, f\} = \left\{f^\dagger, f^\dagger\right\} = 0$ を満たし（ここでは示さなくてよい）、それぞれフェルミオンの消滅演算子および生成演算子と呼ばれる。

[2] $f^\dagger f$ はフェルミオンの個数演算子と呼ばれ、その固有値はフェルミオンの個数（0 個または 1 個）を表す。本問題で扱っている系においては、$f^\dagger f$ の固有値が 1 の状態をフェルミオン的な状態、固有値が 0 の状態をボゾン的な状態と解釈する。