量子力学II（上田正仁）　中間試験

2018 年 6 月 26 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) 演習問題の難易を教えてください。

(a) 難しすぎる (b) やや難しい (c) 適切である (d) やや易しい (e) 易しすぎる

(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　運動量演算子

一次元座標の自由度を持つ粒子を考える。このときヒルベルト空間は無限次元である。交換関係 $[\hat{x}, \hat{p}] = \mathrm{i}\hbar$ を満たす位置演算子 $\hat{x}$ と運動量演算子 $\hat{p}$ に対して、固有状態 $|x\rangle, |p\rangle$ をそれぞれ $\hat{x}|x\rangle = x|x\rangle, \hat{p}|p\rangle = p|p\rangle$ として定め、座標表示の波動関数を $\psi(x) := \langle x|\psi\rangle$ とする。$\{|x\rangle\}$ と $\{|p\rangle\}$ はそれぞれ以下の規格化条件および完全性条件を満たす。但し、$\delta(x)$ はデルタ関数[1]であり、$\hat{I}$ は恒等演算子である。

$$\langle x|x'\rangle = \delta(x-x'), \quad \langle p|p'\rangle = \delta(p-p'), \quad \int \mathrm{d}x\,|x\rangle\langle x| = \hat{I}, \quad \int \frac{\mathrm{d}p}{2\pi\hbar}\,|p\rangle\langle p| = \hat{I}$$

(1) 交換関係から次の等式を導け。

$$(x-x')\langle x|\hat{p}|x'\rangle = \mathrm{i}\hbar\delta(x-x')$$

(2) デルタ関数についての次の等式を示せ。

$$x\delta'(x) = -\delta(x)$$

(3) 次の等式を示せ。（1 番目の等号は単なる定義なので示す必要は無い。2 番目の等号のみ証明せよ。）

$$\hat{p}\psi(x) := \langle x|\hat{p}|\psi\rangle = -\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}x}(x)$$

[1] デルタ関数 $\delta(x)$ およびその微分は次のようにして定義される。

$$\int_{-\infty}^{\infty}\delta(x-a)f(x)\,\mathrm{d}x = f(a)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty}\delta'(x-a)f(x)\,\mathrm{d}x = -\int_{-\infty}^{\infty}\delta(x-a)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}[f(x)]\,\mathrm{d}x$$

ここで $f(x)$ は無限遠で十分に速くゼロとなる滑らかな任意の関数である。

問題３　空間並進対称性と運動量保存

1 次元空間を運動する粒子を考える。位置演算子 $\hat{x}$ と運動量演算子 $\hat{p}$ が交換関係 $[\hat{x},\hat{p}]=i\hbar$ を満たし、ハミルトニアンが $\hat{x}$、$\hat{p}$、および時刻 t の滑らかな関数 $H(\hat{x},\hat{p};t)$ によって与えられるとする。 また、時刻 t での状態 $|\psi\rangle$ における物理量 $\hat{A}$ の期待値を $\left\langle \hat{A} \right\rangle_\psi (t)$ と表記する。

(1) 任意の時刻 t において、以下の 2 つの命題 (A) と (B) が同値であることを示せ。

(A): $[\hat{p}, H(\hat{x},\hat{p};t)]=0$

(B): 任意の状態 $|\psi\rangle$ に対して $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\hat{p}\rangle_\psi(t)=0$

(2) 空間並進演算子 $\hat{T}(a)$ を次のように定義する。(この大問においては常に a を実数とする。)

$$\hat{T}(a):=\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}a\hat{p}}$$

このとき、$\hat{x}$ と $\hat{p}$ の交換関係を用いて、次の等式を示せ。

$$\hat{T}^\dagger(a)\hat{x}\hat{T}(a)=\hat{x}+a$$

(3) 任意の a に対して $H(\hat{x}+a,\hat{p};t)=H(\hat{x},\hat{p};t)$ が成立するとき、系は空間並進対称性を持つ、という。この条件は (2) で示した事実を用いると次のように書ける。（このように書けることは示さなくてよい。）

(C): 任意の a に対して $\hat{T}^\dagger(a)H(\hat{x},\hat{p};t)\hat{T}(a)=H(\hat{x},\hat{p};t)$

このとき、任意の時刻 t において命題 (A) と (C) が同値であることを示せ。

問題４　スピン・軌道相互作用

原子内の電子の軌道角運動量 $\hat{\mathbf{l}}$ とスピン角運動量 $\hat{\mathbf{s}}$ の間には、次の形のハミルトニアンで表されるスピン・軌道相互作用[2]が働く。

$$\hat{H}_{SO}=\frac{1}{2m^2c^2}\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\hat{\mathbf{l}}\cdot\hat{\mathbf{s}}\equiv\lambda\hat{\mathbf{l}}\cdot\hat{\mathbf{s}}$$

以下では簡単のために角運動量の自由度のみを考え、λ は定数として扱う。

ここで、全角運動量 $\hat{\mathbf{J}}:=\hat{\mathbf{l}}+\hat{\mathbf{s}}$ を導入する。$\hat{\mathbf{l}}^2,\hat{l}_z,\hat{\mathbf{s}}^2,\hat{s}_z$ の同時固有状態を $|l,m_l;s,m_s\rangle\equiv|m_l,m_s\rangle$ とし、$\hat{\mathbf{J}}^2,\hat{J}_z,\hat{\mathbf{l}}^2,\hat{\mathbf{s}}^2$ の同時固有状態を $|J,M;l,s\rangle\equiv|J,M\rangle\rangle$ とする。但し、これらは以下を満たす。

$$\begin{aligned}
&\hat{\mathbf{l}}^2|m_l,m_s\rangle=\hbar^2 l(l+1)|m_l,m_s\rangle,\quad \hat{\mathbf{s}}^2|m_l,m_s\rangle=\hbar^2 s(s+1)|m_l,m_s\rangle,\\
&\hat{l}_z|m_l,m_s\rangle=\hbar m_l|m_l,m_s\rangle,\quad \hat{s}_z|m_l,m_s\rangle=\hbar m_s|m_l,m_s\rangle\\
&\hat{\mathbf{J}}^2|J,M\rangle\rangle=\hbar^2 J(J+1)|J,M\rangle\rangle,\quad \hat{\mathbf{J}}_z|J,M\rangle\rangle=\hbar M|J,M\rangle\rangle,\\
&\hat{\mathbf{l}}^2|J,M\rangle\rangle=\hbar^2 l(l+1)|J,M\rangle\rangle,\quad \hat{\mathbf{s}}^2|J,M\rangle\rangle=\hbar^2 s(s+1)|J,M\rangle\rangle.
\end{aligned}$$

また、一般に角運動量 $\hat{\mathbf{L}}$ について、$\hat{\mathbf{L}}^2|L,M_L\rangle=\hbar^2L(L+1)|L,M_L\rangle,\quad \hat{L}_z|L,M\rangle=\hbar M_L|L,M_L\rangle$ を満たす $\hat{\mathbf{L}}^2$ と $\hat{L}_z$ の同時固有状態 $|L,M_L\rangle$ に対して、昇降演算子 $\hat{L}_\pm:=\hat{L}_x\pm\mathrm{i}\hat{L}_y$ の行列要素は

$$\langle L',M_L'|\hat{L}_\pm|L,M_L\rangle=\hbar\sqrt{(L\mp M_L)(L\pm M_L+1)}\delta_{L',L}\delta_{M_L',M_L\pm1}$$

となることを証明なしに用いてよい。また、この問題においては $l=1, s=1/2$ とする。

(問題は続きます)

[2] V は電子が感じるクーロンポテンシャルであり、$\mathrm{d}V/\mathrm{d}r>0$ である。電子の静止系から見ると原子核が運動しており、それにより生じる電流が作る磁場とスピン角運動量の相互作用がスピン・軌道相互作用である。

(1) 交換関係 $\left[\hat{H}_{SO}, \hat{\mathbf{J}}^2\right]$ 及び $\left[\hat{H}_{SO}, \hat{J}_z\right]$ を計算せよ。

(2) $|J, M\rangle\rangle$ を全て求め、$|m_l, m_s\rangle$ の線型結合によって表せ。

(3) $|J, M\rangle\rangle$ が $\hat{H}_{SO}$ の固有状態になっていることを示し、各 $|J, M\rangle\rangle$ について固有値を求めよ。

問題５　　水素様原子のスペクトラムの代数的導出

3 次元空間における水素様原子のエネルギースペクトラムを講義ノートとは異なる代数的方法で求めよう。シュレディンガー方程式は次のように与えられる。

$$H\Psi(\mathbf{r}) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m_e}\nabla^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\frac{Z}{r}\right]\Psi(\mathbf{r}) = E\Psi(\mathbf{r})$$

ここで、Z は原子の価数である。また、スピン自由度は考えない。ポテンシャルが中心対称なので軌道角運動量量子数 l と磁気量子数 m が保存し（l, m は整数、$l \geq 0, -l \leq m \leq l$）（この大問全体において l は常に 0 以上の整数である。）、エネルギー固有関数は $\Psi(\mathbf{r}) = Y_{lm}(\theta, \phi)R_l(r)$ というように動径成分と角度成分に変数分離できる。ラプラシアンが角運動量演算子 $\hat{\mathbf{L}}$ を用いて表されることに注意すると動径成分の固有値方程式が得られ、更に $R_l(r) = \psi_l(r)/r$ とおくと次のような $\psi_l(r)$ についての固有値方程式が得られる。

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} + \frac{2}{r}\left(\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0}\right)\frac{m_e}{\hbar^2} + 2E_l\frac{m_e}{\hbar^2}\right]\psi_l(\mathbf{r}) = 0$$

ここで、$\mathcal{H}_l(r)$ および ϵ_l を

$$\mathcal{H}_l(r) = -\frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{2}{r}\left(\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0}\right)\frac{m_e}{\hbar^2}$$
$$\epsilon_l = 2E_l\frac{m_e}{\hbar^2}$$

とおくと、固有値方程式は次のように書ける。

$$\mathcal{H}_l(r)\psi_l(r) = \epsilon_l\psi_l(r)$$

ここで、$l \geq 1$ に対して次のような演算子を導入する（**定義の後の「注意」をよく読むこと**）。

$$a_l = \frac{d}{dr} + \frac{l}{r} - \frac{1}{l}\left(\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0}\right)\frac{m_e}{\hbar^2}$$
$$a_l^\dagger = -\frac{d}{dr} + \frac{l}{r} - \frac{1}{l}\left(\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0}\right)\frac{m_e}{\hbar^2}$$
$$c_l = -\frac{1}{l^2}\left(\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0}\right)^2\left(\frac{m_e}{\hbar^2}\right)^2$$

注意：$a_l^\dagger$ という表記について、これは演算子 a_l に共役な演算子という意味で慣習的に用いられる記法だが、ここでは混乱を避けるために、† の意味を深く考えずに $a_l^\dagger$ 全体で一つの記号であると考えよ。

(問題は続きます)

(1) $l \geq 1$ に対して次の等式を示せ。

$$\left[a_l, a_l^\dagger\right] = -\frac{2l}{r^2}$$

(2) $l \geq 1$ に対して次の等式を示せ。また、1 番目の等号については $l = 0$ においても成立することを示せ。

$$\mathcal{H}_l(r) = a_{l+1}a_{l+1}^\dagger + c_{l+1} = a_l^\dagger a_l + c_l$$

(3) $l \geq 1$ に対して、$\mathcal{H}_l$ の固有値・固有関数の組が次のように与えられたとする（k は組を区別するラベル)。

$$\mathcal{H}_l \psi_{l,k} = \epsilon_{l,k}\psi_{l,k}$$

このとき次の等式が成立することを示せ。

$$\mathcal{H}_{l-1}a_l\psi_{l,k} = \epsilon_{l,k}a_l\psi_{l,k}$$

(3) で示した等式より、$a_l\psi_{l,k} = 0$ でなければ $a_l\psi_{l,k}$ が角運動量 $l-1$ に対応する解となり、かつ $\psi_{l,k}$ と同じエネルギー $\epsilon_{l,k}$ を持つことがわかる。すなわち、a_l はエネルギーを保ちながら軌道角運動量量子数 l を減少させる、l に関する下降演算子である。同様にして $\mathcal{H}_{l+1}a_{l+1}^\dagger\psi_{l,k} = \epsilon_{l,k}a_{l+1}^\dagger\psi_{l,k}$ も示すことができ（ここでは示さなくてよい)、$a_l^\dagger$ がエネルギーを保ちながら l を増加させる、l に関する上昇演算子であることがわかる。

(4) $l \geq 0$ に対して、$a_{l+1}^\dagger\psi_{l,0} = 0$ を満たす $\psi_{l,0}$ が $\mathcal{H}_l$ の固有関数であることを示し、対応する固有値 $\epsilon_{l,0}$ を求めよ。

$\epsilon_{l,0}$ の値を $E_{l,0}$ に換算することにより固有エネルギーが得られる。（ここでは求めなくてよい。）
次に $E_{l,0}$ の縮退度を求めよう。(3) で示した事実を用いると、エネルギーが縮退しているが異なる軌角運動量量子数を持つ一連の状態 $\psi_{l,0}, a_l\psi_{l,0}, a_{l-1}a_l\psi_{l,0}, \cdots, a_1\cdots a_{l-1}a_l\psi_{l,0}$ が得られる。

(5) 固有エネルギー $E_{l,0}$ の縮退度が $(l+1)^2$ となることを示せ。

注意：$E_{l,0}$ という表記は固有エネルギーが l という文字でラベルされているが、異なる軌道角運動量量子数を持つ状態が縮退していることから明らかなように、$E_{l,0}$ におけるラベル l は「固有状態の軌道角運動量量子数」ではなく、「同じ固有エネルギーを持つ一連の固有状態の中で最大の軌道角運動量量子数」である。

(問題は以上です)