☆☆　量力演習の解説　☆☆

藤田　丈久

(よろず物理研究所)

はじめに

これまで電磁気学と力学を解説する教科書は書いてきたが，量子力学の教科書を書いてはいない．これは量子力学を学ぶ場合，Dirac 方程式がその出発点となるため，学部で学ぶ量子力学の教科書を書く事がそう簡単ではないと感じているからである．但し，学部で学ぶ量子力学の基礎については大学の講義ノートで解説はしているので
http://allphysics.sakura.ne.jp/ryorik91.htm
http://allphysics.sakura.ne.jp/ryorik82.htm
http://allphysics.sakura.ne.jp/ryoshi331.htm
必要な場合，この講義ノートを参照して頂くことにしよう．

量子力学は物理学科の３年次に学ぶ科目となっているが，これは力学から発展した学問と言うわけではないので，その点では量子力学の導入には注意が必要である．特に，量子力学においてはその概念的なところが難しいと言えよう．古典力学ではそこに現れる物理量が基本的には観測量になっている．ところが量子力学においては観測量はオペレータの固有値かその期待値を求める事で得られている．このため，量子力学を深く理解するためにはこの概念的なジャンプを埋めて行く事が非常に重要である．

ここでは量子力学の演習問題を解説して行こう．量子力学における演習問題は基本的に言って，１体問題を解くことになっている．従って新しい概念さえきちんと押さえて行けば，割合，任意性が少なく，わかり易い科目であるとも言える．この問題集の解答自体は付録に入れてあるので各自が必要に応じて参照して頂こう．但し，問題と解答が１対１対応されていない所が数か所あり，適当に省略されている場合がある．

物理を深く理解するためにはまずは演習問題を解く事である．この事は，以前から機会あるごとに言っている事ではあるが，しかしながら演習問題を一人で解き切ることはそう簡単な事とは言えないであろう．少なくとも自分に取ってはそうであった．それで，ここではその演習問題を解く上において注意するべき様々なポイントを解説して行こう．

どのような形の小ノートが出来上がるのか，書き始めた今の自分には良くわからないが，頑張れば新しい方向性を持つ量子論の小ノートが出来上がる可能性はあると考えている．解説の部分ではあるいは少しマニアックな物理の議論が入ってくるかも知れないが，それはいつもの事でもあろう．

目 次

第1章　量子力学演習問題　NO. 1

量子力学の方程式を学ぶ前に，まずはオペレータ (演算子) と言う概念に慣れておく必要がある．このため，しばらくはこのオペレータについて慣れるための問題を解くことになる．量子力学で現れるオペレータは基本的に言って，行列と微分演算子である．このため，線形代数の基本的な知識がある程度，必要であるがこれは付録を参照して頂こう．

1.1　エルミート行列

演習問題 No.1 の [1] は Pauli 行列の問題である．Pauli 行列とは２行２列のエルミート行列の事である．具体的に書くと

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{1.1}$$

と書けている．この場合，エルミート行列 A の定義は

$$A = A^\dagger \tag{1.2}$$

であるが $A^\dagger$ とは $A^\dagger = (A^t)^*$ の事である．式 (1.2) を成分で書くと

$$A_{ij} = (A^\dagger)_{ij} = A^*_{ji} \tag{1.3}$$

となる．これがエルミート行列である．２行２列の複素数の行列の成分の数は８個である．式 (1.2) は４個の条件があるので，２行２列のエルミート行列には４個の独立な行列がある．具体的に書くと $a,\ b,\ ,c\ ,d$ を実数として

$$A = \begin{pmatrix} a & c+di \\ c-di & b \end{pmatrix} = A^\dagger \tag{1.4}$$

と書く事ができる．この行列 A は Pauli 行列 $\sigma_x,\ \sigma_y,\ \sigma_z$ で

$$A = c_0 + c_1\sigma_x + c_2\sigma_y + c_3\sigma_z \tag{1.5}$$

と書く事ができる．但し，c_0 ，c_1 ，c_2 ，c_3 は式 (1.4) の a, b, c, d で表す事ができる．この証明は連立方程式を解くだけだから簡単ではあるが，しかしながら演習問題として必ず，自分で計算する事が必須である．

1.2　状態関数

行列を書いてもそれだけでは意味をなさない．この行列が演算する相手を考える必要がある．この場合，行列がオペレートされる相手の事を状態関数とか状態ベクトルとか呼んでいる．今，２列の状態ベクトルを u として，これは

$$\boldsymbol{u} = \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix} \tag{1.6}$$

と書く事ができる．この場合，u_1, u_2 は未知変数である．量子力学で重要になるのは固有値問題であり，これは演算子 A が状態ベクトル u に掛かると元の状態ベクトル u に戻ると言う方程式である．この固有値方程式は

$$A\boldsymbol{u} = \lambda \boldsymbol{u} \tag{1.7}$$

と書かれていて，この λ を固有値と呼んでいる．この固有値が量子力学では観測量になっていて，従ってこれは必ず，実数である必要がある．実際，エルミート行列の固有値は実数であることが簡単に証明できる．２行２列のエルミート行列の場合，具体的に計算すると証明できるので，ここに書いておこう．式 (1.7) は

$$\begin{pmatrix} a & c+di \\ c-di & b \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix} \tag{1.8}$$

となっている．これは２変数の連立方程式なので簡単に解けるが，ここでは u_1, u_2 が non-zero の解を求めることになる．これは

$$(a-\lambda)(b-\lambda) - (c+di)(c-di) = 0 \tag{1.9}$$

であり，λ に対する２次方程式である．この根が固有値を与えているが，この解は

$$\lambda = \frac{1}{2}\left\{(a+b) \pm \sqrt{(a-b)^2 + 4(c^2+d^2)}\right\} \tag{1.10}$$

と求まる．これは確かに実数である．エルミート行列の固有値は実数であると言う一般的な証明はさらに簡単であるが，後程，見て行こう．

1.3　微分演算子

次に微分演算子について解説して行こう，この場合も，微分演算子がオペレートする相手の関数 (状態関数) の導入が必須である．１次元を考えると微分演算子 O_x を

$$O_x = \frac{\partial}{\partial x} \tag{1.11}$$

と定義しよう．この O_x を状態関数 $\phi(x)$ にオペレートして，これがまた元の $\phi(x)$ に戻る場合は，やはり固有値方程式と言う．これは

$$O_x \phi(x) = \frac{\partial}{\partial x}\phi(x) = \alpha\phi(x) \tag{1.12}$$

と書く事ができる．この場合も α をその固有値と呼んでいる．量子力学では微分演算子を偏微分で書く事が多いが，これは状態関数が時間の関数になっていると考えている事にも依っている．さらに実際は３次元を考えるため，これはどうしても偏微分で書いた方が良いと言う事になっている．

1.4　交換関係

２個の演算子 $A,\ B$ の間に交換関係

$$[A, B] \equiv AB - BA \tag{1.13}$$

を定義する．これは量子力学だけではなく，例えば群論などでもよく使われているものである．しかしこの交換関係自体に物理的な意味はない．しかし例えば，行列の場合における２個の演算子 $A,\ B$ に対して一般的には

$$[A, B] \neq 0 \tag{1.14}$$

である．また微分演算子 $O_x = \frac{\partial}{\partial x}$ と x は交換しない．すなわち

$$[O_x, x]\phi(x) = \frac{\partial}{\partial x}\Big(x\phi(x)\Big) - x\frac{\partial}{\partial x}\phi(x) = \phi(x) \tag{1.15}$$

となっている．

1.5　運動量演算子 $\hat{p}$

量子力学では運動量演算子 $\hat{p}$ を

$$\hat{\boldsymbol{p}} \equiv -i\hbar\boldsymbol{\nabla} \tag{1.16}$$

と定義している．ここで $\hbar$ は Planck 定数である．また $\boldsymbol{\nabla}$ (ナブラ) は

$$\boldsymbol{\nabla} = \left(\frac{\partial}{\partial x},\ \frac{\partial}{\partial y},\ \frac{\partial}{\partial z}\right) \tag{1.17}$$

によって定義されている．何故，運動量演算子を式 (1.16) のように定義したのかと言う問題は，基本的には Dirac 方程式に戻って考える必要がある．質量 m の自由粒子の Dirac 方程式は１階の微分方程式となっているが，これは (以下 $c = 1$ としている)

$$\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} + i\hbar\boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{\alpha} - m\beta\right)\psi(\boldsymbol{r}, t) = 0 \tag{1.18}$$

と書かれている．但し

$$\boldsymbol{\alpha} = \begin{pmatrix} 0 & \boldsymbol{\sigma} \\ \boldsymbol{\sigma} & 0 \end{pmatrix}, \qquad \beta = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{1.19}$$

である．この自由粒子解として

$$\psi(\boldsymbol{r}, t) = u_{\boldsymbol{p}} \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r} - \frac{i}{\hbar}Et\right\} \tag{1.20}$$

とする．但し，$u_{\boldsymbol{p}}$ は４列のベクトルである． この場合，式 (1.18) は

$$\big(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{\alpha} + m\beta\big)u_{\boldsymbol{p}} = Eu_{\boldsymbol{p}} \tag{1.21}$$

となっている．これは４行４列の行列方程式である．ここで E を求めるため

$$\det\Big(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{\alpha} + m\beta - E\Big) = 0 \tag{1.22}$$

と行列式を計算する．これより $E_{\boldsymbol{p}} = \pm\sqrt{m^2 + \boldsymbol{p}^2}$ が求まる．また $u_{\boldsymbol{p}}$ は

$$u_{\boldsymbol{p}} = \sqrt{\frac{E_{\boldsymbol{p}} + m}{2E_{\boldsymbol{p}}}}\begin{pmatrix} \chi_s \\ \frac{\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p}}{E_{\boldsymbol{p}}+m}\chi_s \end{pmatrix}, \qquad \chi_\uparrow = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \qquad \chi_\downarrow = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \tag{1.23}$$

と決定されている．そして Dirac 方程式の式を見てみると確かに運動量演算子として $\hat{p} = -i\hbar\boldsymbol{\nabla}$ を導入するとうまく行くと言う事がわかるものである．

1.6 系の Hamiltonian

量子力学においては質量 m の１粒子系の Hamiltonian $\hat{H}$ を

$$\hat{H} = \frac{\hat{\boldsymbol{p}}^2}{2m} + U(r) \tag{1.24}$$

で定義している．ここで $U(r)$ はポテンシャルである．この場合，Schrödinger 方程式は

$$\Big(-\frac{\hbar^2}{2m}\boldsymbol{\nabla}^2 + U(r)\Big)\psi(\boldsymbol{r}) = E\psi(\boldsymbol{r}) \tag{1.25}$$

となる．ここで E はエネルギー固有値であり，$\psi(\boldsymbol{r})$ が状態関数を表している．量子力学ではこの固有値方程式を境界条件の下で解くと言う事が主な作業となっている．

1.7 No.1 の問 6

この問題のように，演算子 $A,\ B$ が交換しない場合，様々な恒等式が知られている．これはその内の一つであるが $[A, B] = \hbar$ の時，

$$e^A e^B = e^{A+B+\frac{\hbar}{2}} \tag{1.26}$$

を証明せよと言う問題である．この時，$f(t)$ を

$$f(t) = e^{At}e^{Bt}e^{-(A+B+\frac{\hbar}{2})t} \tag{1.27}$$

とおいて，$f(t)$ に対する微分方程式を求めてそれを解くと簡単に証明できると言う事である．これは物理とは直接，関係があるわけではないので，重要な問題ではない．しかしこうした数学の技術を学ぶ事も結構，楽しいものである．このような手法を思いつくのは数学者にまかせておけば良く，その技術だけをしっかり覚えておけば良いかと思われる．

1.8 ベクトルの内積

内積はベクトル空間で定義されている．２個のベクトル $\boldsymbol{a} = (a_1,\ a_2,\ a_3)$, $\boldsymbol{b} = (b_1,\ b_2,\ b_3)$ に対してその内積を

$$(\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b}) = a_1b_1 + a_2b_2 + a_3b_3 \tag{1.28}$$

で定義している．一般にベクトル $\boldsymbol{a},\ \boldsymbol{b}$ が

$$\boldsymbol{a} = (a_1,\ a_2,\ \cdots, a_n), \quad \boldsymbol{b} = (b_1,\ b_2,\ \cdots, b_n) \tag{1.29}$$

と n 個の成分を持っている時，２個のベクトルの内積は

$$(\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b})=\sum_{i=1}^{n}a_ib_i \tag{1.30}$$

となっている．さらに複素数の変数を持つベクトル $\boldsymbol{u},\ \boldsymbol{v}$

$$\boldsymbol{u}=(u_1,\,u_2,\,\cdots,u_n),\qquad \boldsymbol{v}=(v_1,\,v_2,\,\cdots,v_n) \tag{1.31}$$

に対して，複素数内積が

$$<\boldsymbol{u},\ \boldsymbol{v}>=\sum_{i=1}^{n}u_i^*v_i \tag{1.32}$$

で定義されている．この様に内積を定義した場合，内積の諸性質がすべて満たされている事が証明されているのである．

1.9 量子力学の内積

ここで量子力学の内積を定義しておこう．ここでは１次元を考えて行くが，これは表記が簡単なためである．まず，２個の状態関数 $\psi_1(x),\ \psi_2(x)$ を考えよう．これらは座標 x の関数である．ここで２個の状態関数の内積を

$$<\psi_1,\ \psi_2>=\int_{-\infty}^{\infty}\psi_1^\dagger(x)\psi_2(x)dx \tag{1.33}$$

と定義している．今の場合， $\psi^\dagger$ は ψ^* と同じであるが，より一般的に書いている．この内積は積分で定義されているが，基本的には積分は和である．従って，この式は複素数のベクトルの内積である式 (1.32) と同じと考えて十分である．

1.10 エルミート演算子の固有値は実数

エルミート行列の固有値が実数であることの証明は簡単であるが．非常に重要である．それは観測量は必ず実数であるので，量子力学で出てくるオペレータはエルミート性を満たすものでなければならないと言う事である．

この場合，エルミート行列 A の固有値方程式は

$$Au = \lambda u \tag{1.34}$$

である．ここで u と Au の内積をとると

$$\begin{aligned}< \boldsymbol{u}, A\boldsymbol{u} > &= \sum_{i=1,\cdots,n} u_i^* \left(\sum_{j=1,\cdots,n} a_{ij} u_j \right) = \sum_{i=1,\cdots,n} u_i^* \left(\sum_{j=1,\cdots,n} a_{ji}^* u_j \right) \\ &= \sum_{j=1,\cdots,n} \left(\sum_{i=1,\cdots,n} a_{ji} u_i \right)^* u_j = (A\boldsymbol{u}, \boldsymbol{u})\end{aligned}$$

とエルミート行列の性質 $A_{ij} = A_{ji}^*$ を使って書き直すことができる．これは

$$(\boldsymbol{u}, A\boldsymbol{u}) = (A\boldsymbol{u}, \boldsymbol{u}) \qquad \Rightarrow \qquad \lambda(\boldsymbol{u}, \boldsymbol{u}) = \lambda^*(\boldsymbol{u}, \boldsymbol{u})$$

となっている．よって $\lambda = \lambda^*$ であり，エルミート行列の固有値 λ は実数である．

1.11 微分演算子のエルミート性

ここで，微分演算子のエルミート性について解説しよう．この場合，何故，虚数 i が出てくるのかが良く分かるものと思う．今，簡単のために運動量演算子 p_x のエルミート性を調べよう．このためには p_x の期待値を取る事になる．すなわち

$$\begin{aligned}< \psi_1, p_x \psi_2 > &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi_1^\dagger(x) \Big(-i \frac{\partial}{\partial x} \psi_2(x) \Big) dx = \int_{-\infty}^{\infty} \Big(i \frac{\partial}{\partial x} \psi_1^\dagger(x) \Big) \psi_2(x) dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \Big(-i \frac{\partial}{\partial x} \psi_1(x) \Big)^\dagger \psi_2(x) dx = < p_x \psi_1, \psi_2 > \end{aligned} \tag{1.35}$$

となり， p_x のエルミート性が証明された．ここで部分積分から出てくる項に対して $\psi_{1,2}(\pm\infty) = 0$ を使っている．この証明から，虚数 i の重要性が良く理解できるものと思う．

1.11.1 運動量演算子のエルミート性

運動量演算子 p_x のエルミート性が証明されるのは無限遠方で状態関数がゼロであると言う条件が必須である．ところが，自由粒子の場合，この条件を課すことができない．自由粒子は箱に入れて，そこで周期的境界条件を付けて解く事で整合性が保たれている．しかしこの時は運動量演算子 p_x のエルミート性を仮定すると $[p_x, x] = -i\hbar$ の交換関係式に矛盾が出てくる．この問題は後程，第１２章で議論しよう．

第2章　量子力学演習問題　NO. 2

ここでは１次元系における Schrödinger 方程式を解いて行く事になる．１次元のポテンシャルを $U(x)$ とすると方程式は

$$i\hbar\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi(x,t)}{\partial x^2} + U(x)\Psi(x,t) \tag{2.1}$$

となる．これが量子力学の基礎方程式である．この場合，状態関数 (波動関数) $\Psi(x,t)$ が粒子を記述する情報をすべて持っていると言う事になっている．

2.1　Ehrenfest の定理

　量子力学の方程式から Newton 方程式が導かれる．これを Ehrenfest の定理と言う．証明は簡単であるが，しかしその物理的な意味合いは極めて重要である．まずはオペレータ $\hat{A}$ の期待値を

$$< \Psi|\hat{A}|\Psi > \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t)\hat{A}\Psi(x,t)dx \tag{2.2}$$

で定義しよう．そして x の期待値 $< \Psi|x|\Psi >$ の時間発展を計算する．すなわち

$$\frac{d < \Psi|x|\Psi >}{dt} = \int_{-\infty}^{\infty}\Big(\frac{d\Psi^*(x,t)}{dt}\Big)x\Psi(x,t)dx + \int_{-\infty}^{\infty}\Psi^*(x,t)x\Big(\frac{d\Psi(x,t)}{dt}\Big)dx \tag{2.3}$$

である．ここで Schrödinger 方程式 [eq.(2.1)] を使って計算すると

$$\frac{d < \Psi|x|\Psi >}{dt} = \frac{1}{m} < \Psi|\hat{p}_x|\Psi > \tag{2.4}$$

が証明できる．さらに運動量演算子 $\hat{p}_x$ の時間発展を計算すると

$$\frac{d < \Psi|\hat{p}_x|\Psi >}{dt} = - < \Psi\Big|\frac{\partial U(x)}{\partial x}\Big|\Psi > \tag{2.5}$$

と求まる．

ここで期待値を省略すると

$$\frac{dx}{dt} = \frac{p_x}{m}, \quad \frac{dp_x}{dt} = -\frac{\partial U(x)}{\partial x} \tag{2.6}$$

となり，これは

$$m\frac{d^2x}{dt^2} = -\frac{\partial U(x)}{\partial x} \tag{2.7}$$

なので，Newton 方程式そのままである．すなわち，Schrödinger 方程式を使って座標の期待値の時間発展を計算するとこれは Newton 方程式が求まると言う事である．これが Ehrenfest の定理である．ここで最も重要な点は，座標の時間依存性は波動関数の時間依存性を引きずっていると言う事である．これから見ても明らかなように，古典力学はかなり drastic な近似によって量子力学から求められていると言う事実である．そして Newton 力学において座標が時間によると言う奇妙な現象は近似をしたからそのように見えていると言う事である．

但し，マクロな量，例えば惑星の運動を記述する場合，量子論的な効果は全く考える必要はないと言う事が良く分かるものと思われる．しかしながら，Schrödinger 方程式も Dirac 方程式から近似して求められている．このため，量子論的な影響はないが，しかし相対論的な効果は出てくる可能性があると言える．現実に重力ポテンシャルには相対論的な効果が付加ポテンシャルとして現れている．さらに，地球の公転速度 v は $v \simeq 10^{-4}c$ なので，地球の公転周期に対する補正としてこの効果が $(v/c)^2 \simeq 10^{-8}$ の大きさで出てくるはずである．実際，１年間は約 $\pi \times 10^7$ 秒なのでその $10^{-8} \times \pi \times 10^7 \sim 0.3$ 秒程度のずれがあると予想されている．実際，これは確かにうるう秒として観測されているのである．

2.2 波動関数の規格化

波動関数 $\Psi(x,t)$ は分布関数である．このため，オペレータの期待値を取る時，それが規格化されている必要がある．すなわち

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x,t)|^2 dx = 1 \tag{2.8}$$

である．ここには波動関数 $\Psi(x,t)$ がまだ時間依存であるとしているが，量力演習で扱う問題は全て，時間依存は $e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$ として変数分離される形を採用している．この時間依存の問題が具体的に入ってくる場合が散乱理論である．しかしこれは学部の物理で扱う事はない．勿論，これは難し過ぎるからである．

2.3　変数分離

Schrödinger 方程式は変数分離型の微分方程式である．

$$i\hbar\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x)\right)\Psi(x,t) \tag{2.9}$$

ここで $\Psi(x,t) = T(t)u(x)$ とすると

$$\frac{i\hbar}{T(t)}\frac{dT(t)}{dt} = \frac{1}{u(x)}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2u(x)}{dx^2} + U(x)u(x)\right) = E \tag{2.10}$$

となる．この時，上式の両辺は定数なので，これを E としている．ここで，時間に関する微分方程式は直ちに解けて

$$\Psi(x,t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Et}u(x) \tag{2.11}$$

となる．ここで $u(x)$ に対する方程式は

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + U(x)\right)u(x) = Eu(x) \tag{2.12}$$

であり，これは時間に依存しない Schrödinger 方程式となっている．この式から E はエネルギー固有値である事がわかる． そして上式の括弧の中を $\hat{H}$ として

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + U(x) = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + U(x) \tag{2.13}$$

と定義している．この $\hat{H}$ を Hamiltonian と呼んでいる．科学史的には古典力学の Hamiltonian から『量子化』の手法で Schrödinger が量子力学を発見したものである．それはそれで歴史的には非常に重要である．しかしながら，現在，物理学を学ぶ上では科学史的な考え方はプラスにはならなく，むしろ弊害とさえなっている場合がある事に注意する必要があろう．

2.4 井戸型 (square well) ポテンシャルの問題

量力演習の定番問題が井戸型ポテンシャルにおけるエネルギー固有値を求めるものである．時間に依らない Schrödinger 方程式は

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+U(x)\right)u(x)=Eu(x) \tag{2.14}$$

であった．ここでポテンシャルとして

$$U(x)=\begin{cases} 0 & : \quad |x|>a \\ -U_0 & : \quad |x|<a \end{cases} \tag{2.15}$$

のようなものを考えようと言うもので，これを井戸型ポテンシャルと呼んでいる．このポテンシャルに束縛された質量 m の粒子の束縛状態のエネルギー固有値とその波動関数を求めようと言うものである．この問題を解く上で最も重要な事は『境界条件』である．これはなかなか慣れないとわかり難いものであろう．基本的には２階の微分方程式を解くためには条件が少なくとも２個は必要であると言う事と関係している．実際問題としては，E も未知変数なのでもう一つ条件が必要である．そしてそれが波動関数の規格条件である．今の場合，境界条件としては

$$u(\pm\infty)=0 \tag{2.16}$$

が必要である．これは無限遠方において，粒子の存在確率がゼロである必要があるための条件である．

2.4.1 井戸型ポテンシャルのエネルギー

これらの条件から井戸型ポテンシャルのエネルギーの束縛状態を与える方程式が求まっている．これは

$$\sqrt{-\frac{2mEa^2}{\hbar^2}}=\sqrt{\frac{2m(E+U_0)a^2}{\hbar^2}}\tan\left(\sqrt{\frac{2m(E+U_0)a^2}{\hbar^2}}\right) \tag{2.17}$$

となっていて，これから E を数値計算により求める事ができる．

2.5　対称性

物理学において対称性は常に非常に重要な役割を果たしている．これをきちんと理解していると，例えば量子演習の問題でその対称性をうまく使える場合，計算間違いを最小限にする事ができると思われる．

ここでは簡単な解説をして行こう．今，変換のオペレータとして

$$\hat{P}\psi(x) = \psi(-x) \tag{2.18}$$

を考えよう．３次元ではこれは Parity 変換と呼ばれている．ここで Hamiltonian として

$$\hat{H}(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + U(|x|) \tag{2.19}$$

を考えよう．この場合，固有値方程式は

$$\hat{H}(x)\psi(x) = E\psi(x) \tag{2.20}$$

である．この両辺に $\hat{P}$ をオペレートすると

$$\hat{P}\hat{H}(x)\psi(x) = E\hat{P}\psi(x), \quad \Rightarrow \quad (\hat{P}\hat{H}(x)\hat{P}^{-1})\,(\hat{P}\psi(x)) = E(\hat{P}\psi(x)) \tag{2.21}$$

となる．ここで

$$\hat{P}\hat{H}(x)\hat{P}^{-1} = \hat{H}(-x) = \hat{H}(x) \tag{2.22}$$

なので，式 (2.21) は

$$\hat{H}(x)(\hat{P}\psi(x)) = E(\hat{P}\psi(x)) \tag{2.23}$$

となっている．この場合，式 (2.23) は $\hat{P}\psi(x)$ も $\hat{H}(x)$ の固有関数であることを示している．従って $\hat{P}\psi(x)$ は $\psi(x)$ に比例していなければならない．すなわち

$$\hat{P}\psi(x) = k\psi(x) \tag{2.24}$$

である．これは $\psi(x)$ は $\hat{P}$ の固有関数でもある事を意味している．今の場合，

$$\hat{P}^2\psi(x) = \psi(x) \quad \Rightarrow \quad \hat{P}^2\psi(x) = k^2\psi(x) \tag{2.25}$$

なので，これより

$$k = \pm 1 \tag{2.26}$$

である．従って，この Hamiltonian の固有関数 $\psi(x)$ は

$$\psi(x) = \pm\psi(-x) \tag{2.27}$$

のどちらかを必ず満たすものとなっている．すなわち，固有関数 $\psi(x)$ は遇関数か奇関数かどちらかとなっていて，それらが混じる事はない．

2.6　同時固有関数

オペレータ $\hat{A}$ と $\hat{B}$ が交換する場合，

$$[\hat{A}, \hat{B}] = 0 \tag{2.28}$$

$\hat{A}$ と $\hat{B}$ は同時固有関数 ψ を持つ．すなわち，

$$\hat{A}\psi = a\psi, \qquad \hat{B}\psi = b\psi \tag{2.29}$$

である．この証明は式 (2.22)，(2.23) にあるので省略しよう．

第3章　量子力学演習問題　NO. 3

ここでは規格直交関数について学ぶ事が主な目的である．これは基本的に数学の技術ではあるが，かなり重要でもある．

3.1　規格直交関数系

エルミートオペレータ $\hat{A}$ の固有関数を $\phi_1, \phi_2, \cdots \phi_n$ その固有値を $\lambda_1, \lambda_2, \cdots \lambda_n$ とする．すなわち，

$$\hat{A}\phi_n = \lambda_n \phi_n \tag{3.1}$$

である．この時，ϕ_n は $<\phi_n|\phi_n>= 1$ と規格化されているとして

$$<\phi_n, \phi_m>= \delta_{nm}, \qquad (\mathrm{for} \quad \lambda_\mathrm{n} \neq \lambda_\mathrm{m}) \tag{3.2}$$

が成り立っている．この証明は簡単で

$$<\phi_n, \hat{A}\phi_m>= \lambda_m <\phi_n, \phi_m>=<\hat{A}\phi_n, \phi_m>= \lambda_n <\phi_n, \phi_m> \tag{3.3}$$

となっているので，これは

$$(\lambda_m - \lambda_n) <\phi_n, \phi_m>= 0 \tag{3.4}$$

となり，式 (3.2) が証明されている．

3.2　完全規格直交関数系

　ここで完全規格直交関数系についても簡単に解説しておこう．完全とは式 (3.2) に加えて，さらに次式

$$\sum_{n=1}^{\infty} |\phi_n >< \phi_m| = 1 \tag{3.5}$$

が成り立っている場合である．完全とは任意の状態関数を完全規格直交関数系 ϕ_n

$$\psi_1, \psi_2, \cdots, \psi_n \quad (n \to \infty) \tag{3.6}$$

により完全に記述できると言う事である．今，$\Psi(x)$ と言う関数を完全規格直交関数系 ψ_n で書き表すために

$$|\Psi(x) >= \sum_{n=1}^{\infty} c_n |\psi_n > \tag{3.7}$$

と展開して見よう．ここでは表記としてベクトルであることを explicit にかいている．この時，c_n は

$$c_n =< \psi_n|\Psi(x) > \tag{3.8}$$

となる．従って，式 (3.9) は

$$|\Psi(x) >= \sum_{n=1}^{\infty} |\psi_n >< \psi_n|\Psi(x) > \tag{3.9}$$

と書く事ができる．これより，もし

$$\sum_{n=1}^{\infty} |\psi_n >< \psi_n| = 1 \tag{3.10}$$

ならば，$\Psi(x)$ を完全に記述することが出来ている．ついでに (3.9) (3.10) 式の座標表示も書いておこう．これは

$$\Psi(x) = \sum_{n=1}^{\infty} \psi_n(x) \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^{\dagger}(x')\Psi(x')dx' \tag{3.11}$$

$$\sum_{n=1}^{\infty} \psi_n(x)\psi_n^{\dagger}(x') = \delta(x - x') \tag{3.12}$$

である．

3.3 Sum Rule

昔(１９７０年代始め)，原子核理論の世界では sum rule を利用してある種の現象をうまく理解しようと言う模型計算が流行したことがあった．sum rule は一般的な法則のため利用価値が高い場合が確かにあったものである．ここでは

$$\sum_{n=1}^{\infty}(E_n - E_0)\ |< u_0|x|u_n >|^2 = \frac{\hbar^2}{2m} \tag{3.13}$$

と言う sum rule について議論している．ここで $\hat{H}$ を

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + U(x) \tag{3.14}$$

とする時，Schrödinger 方程式は

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + U(x)\right)u_n(x) = E_n u_n(x) \tag{3.15}$$

と書けている．この時，E_n, u_n は量子数 n で指定される固有値とその固有関数である．また E_0 をその系の基底状態のエネルギーとしている．式 (3.13) の証明の場合，

$$< u_0|[[\hat{H}, x], x]|u_0 >= -\frac{\hbar^2}{m} \tag{3.16}$$

を計算して示せばよく，それ程大変な計算ではない．この場合，式 (3.16) をバラして

$$\begin{aligned} < u_0|[[\hat{H}, x], x]|u_0 > &= < u_0|\hat{H}x^2 - 2x\hat{H}x + x^2\hat{H}|u_0 > \\ &= \sum_n |< u_0|x|u_n >|^2(E_0 - E_n) = -\frac{\hbar^2}{m} \end{aligned} \tag{3.17}$$

と計算すればよい．この場合，

$$\hat{H}|u_0 >= E_0|u_0 >, \qquad \hat{H}|u_n >= E_n|u_n > \tag{3.18}$$

を使っている．

3.4 オペレータの時間発展

ここでオペレータの時間発展について議論しよう．まず，オペレータ $\hat{F}$ の期待値を考えよう．これは

$$< \Psi|\hat{F}|\Psi >= \int \Psi^*(\boldsymbol{r},t)\hat{F}\Psi(\boldsymbol{r},t)d^3r \tag{3.19}$$

である．ここで，この期待値の時間発展を考えよう．これは

$$i\hbar\frac{d < \Psi|\hat{F}|\Psi >}{dt} =< \Psi|[\hat{F},H]|\Psi > \tag{3.20}$$

となる．

3.4.1 オペレータの行列要素 F_{nm} の時間発展

ここでオペレータの行列要素 F_{nm} の時間発展を見て行こう．行列要素は

$$F_{nm} \equiv< \Psi_n|\hat{F}|\Psi_m >= \int \Psi_n^*(\boldsymbol{r},t)\hat{F}\Psi_m(\boldsymbol{r},t)d^3r \tag{3.21}$$

である．ここで固有値方程式は

$$\hat{H}\Psi_n(\boldsymbol{r},t) = E_n\Psi_n(\boldsymbol{r},t) \tag{3.22}$$

である．従って

$$i\hbar\frac{dF_{nm}}{dt} = (E_m - E_n)F_{nm} \tag{3.23}$$

が成り立っている．

3.5 Heisenberg 表示

これまでの計算は全て Schrödinger 表示で行われている．すなわち，状態関数が時間依存になっていて，オペレータは時間には依っていないと言うものである．

ここでは Heisenberg 表示について簡単に解説しよう．それ程，意味があるわけではないが，知っておいたほうが良いと言う程度である．表示を区別するために Schrödinger 表示の状態関数を Ψ_S とし Heisenberg 表示を Ψ_H としよう．そしてオペレータに関しても同様で，F_S, F_H と表記して行こう．Schrödinger 方程式は

$$i\hbar\frac{\partial\Psi_S}{\partial t} = H\Psi_S \tag{3.24}$$

である．ここで

$$\Psi_H = e^{\frac{i}{\hbar}Ht}\Psi_S \tag{3.25}$$

により Heisenberg 表示の状態関数 Ψ_H を導入しよう．この時

$$i\hbar\frac{\partial\Psi_H}{\partial t} = -He^{\frac{i}{\hbar}Ht}\Psi_S + e^{\frac{i}{\hbar}Ht}H\Psi_S = 0 \tag{3.26}$$

となり，Ψ_H は時間に依らない．そして期待値はどの表示でも同じなので

$$< \Psi_H|F_H|\Psi_H >=< \Psi_S|F_S|\Psi_S >=< \Psi_S|e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}F_He^{\frac{i}{\hbar}Ht}|\Psi_S > \tag{3.27}$$

となっている．これより

$$F_H = e^{\frac{i}{\hbar}Ht}F_Se^{-\frac{i}{\hbar}Ht} \tag{3.28}$$

求まる．この時間発展を計算すると

$$i\hbar\frac{dF_H}{dt} = [F_H, H] \tag{3.29}$$

と求まる．これは式 (3.20) と一致している．

3.6 Virial 定理

ここで Virial 定理の証明について見て行こう．この場合，

$$i\hbar \frac{dF_{nm}}{dt} = < \Psi_n | [\hat{F}, \hat{H}] | \Psi_m > \tag{3.30}$$

の式を使う事になる．但し，Hamiltonian は

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\boldsymbol{\nabla}^2 + U(r) \tag{3.31}$$

で与えられるとしているので，期待値も３次元の積分となっている．ここで $\hat{F}$ として

$$\hat{F} = \boldsymbol{r} \cdot \boldsymbol{p} \tag{3.32}$$

と取ろう．この時，式 (3.30) において対角成分 $n = m$ の時，

$$\frac{dF_{nn}}{dt} = 0 \tag{3.33}$$

なので，この式の右辺の交換関係を計算すれば良い．その結果，

$$2 < \Psi_n \left| \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m} \right| \Psi_n > = < \Psi_n | \boldsymbol{r} \cdot \boldsymbol{\nabla} U(r) | \Psi_n > \tag{3.34}$$

が成り立っている事が示される．これが量子力学における Virial 定理として知られているものである．簡単な式であるが，予想以上に応用範囲が広いものであり，非常に useful である．これは明らかであろう．この式では運動エネルギーの期待値がポテンシャルの微分の期待値に結びついていると言う式である．この関係式が状態関数を解くことなしに求められていると言う事が非常に重要である．

3.7 $\delta(x)$ 関数型ポテンシャル

量子力学を学び始めた頃，この $\delta(x)$ 関数型ポテンシャルにおける束縛エネルギーを求める計算がうまくできなかったことを覚えている．これはポテンシャルが

$$V(x) = -V_0\delta(x), \qquad (V_0 > 0) \tag{3.35}$$

の時，質量 m の粒子の束縛エネルギーを求めると言う問題である．この場合，１次元の $\delta(x)$ 関数型ポテンシャルに限って束縛状態が存在する事がわかっている．実は，ある２次元 $(1 \oplus 1)$ 場の理論において，Bethe 仮設解により厳密解が求められているが，そこで Dirac 方程式の解を見つける時の問題がこの $\delta(x)$ 関数型ポテンシャルと基本的には同じであった．このため，Bethe 仮設解が解析的に求められたことがわかっている．

この $\delta(x)$ 関数型ポテンシャルの問題を解こうとする場合，まずは領域を２つに分けて解く手法を知っていれば簡単である．すなわち，$x > 0$ (領域 I) と $x < 0$ (領域 II) に分けて解けばよい．この時，波動関数の接続条件についてちょっとした工夫が必要である．まず，波動関数 $u(x)$ として

$$\begin{aligned} u_I(x) &= Ae^{-\alpha x}, \qquad x > 0 \\ u_{II}(x) &= Be^{\alpha x}, \qquad x < 0 \end{aligned} \tag{3.36}$$

とする．ただし $\alpha = \sqrt{\frac{2m|E|}{\hbar^2}}$ である． ここでは境界条件 $(u(\pm\infty) = 0)$ はすでに式 (3.36) には考慮済みである．次は波動関数の接続条件 $u_I(0) = u_{II}(0)$ であり，これは $A = B$ となっている．しかし，これだけでは不十分で，もう一つ条件が必要である． Schrödinger 方程式そのものをを $-\epsilon < x < \epsilon$ (但し ϵ は無限小) で積分する必要がある．すなわち

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\epsilon}^{\epsilon}\frac{d^2u(x)}{dx^2}dx - V_0\int_{-\epsilon}^{\epsilon}\delta(x)u(x)dx = E\int_{-\epsilon}^{\epsilon}u(x)dx \tag{3.37}$$

を計算すれば，エネルギー固有値が求まると言うものである．実際，これは簡単に計算出来てエネルギー固有値 E は

$$E = -\frac{mU_0^2}{2\hbar^2} \tag{3.38}$$

と求められている．

3.7.1 井戸型ポテンシャルとの比較

井戸型ポテンシャルのエネルギー E は式

$$\sqrt{-\frac{2mEa^2}{\hbar^2}} = \sqrt{\frac{2m(E+U_0)a^2}{\hbar^2}}\tan\left(\sqrt{\frac{2m(E+U_0)a^2}{\hbar^2}}\right) \tag{3.39}$$

を解くことにより求める事が出来ていた．ここで $\delta(x)$ 関数型ポテンシャルのエネルギーと比較するため，次のような極限操作を行ってゆく．式 (3.39) で $a \to 0,\ \ U_0 \to \infty$ として，しかし aU_0 は有限としよう．この時，式 (2.17) は

$$\sqrt{\frac{-2mE}{\hbar^2}} \simeq \sqrt{\frac{mU_0}{\hbar^2}}\sqrt{\frac{mU_0}{\hbar^2}} \tag{3.40}$$

と書く事が出来る．これは E が

$$E = -\frac{mU_0^2}{2\hbar^2} \tag{3.41}$$

である事に対応している．勿論，これは $\delta(x)$ 関数型ポテンシャルにおける束縛状態のエネルギーの式 (3.38) と一致している．

第4章　量子力学演習問題　NO. 4

この章は調和振動子を解くと言う量子力学における最も重要な定番問題となっている．それはこの問題が解析的に解けると言う事とそれ以外の様々な解法が知られているからでもある．但し，この調和振動子ポテンシャルは現実的なポテンシャルではない．それはこのポテンシャル問題には散乱状態が存在していないからである．従って，自然界に応用する場合には十分な注意が必要である．

4.1　調和振動子の微分方程式

1 次元調和振動子ポテンシャル（ $U(x)=\frac{1}{2}m\omega^2x^2$ ）の Schrödinger 方程式は

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2\right)u(x)=Eu(x) \tag{4.1}$$

である．ここでまず注意するべき事は，この場合のエネルギー固有値 E は常に正の量であると言う事である．通常の束縛状態のエネルギーは無限遠方ではそのポテンシャルが必ずゼロとなっている．このため，そこでのエネルギーをゼロとして測るため束縛エネルギーは常に負である．しかし調和振動子ポテンシャルの場合．そのポテンシャルの強さは無限遠方で無限大になっていて，粒子は閉じ込められている．これから見てもこのポテンシャルが現実的ではないと言う事が良く分かると思う．

4.1.1　微分方程式の解き方

1 次元調和振動子ポテンシャルの微分方程式を解こうとする場合，まずは無次元化してわかり易くするのが最初にするべき事であろう．このため

$$\xi=\alpha x, \qquad \alpha=\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}, \qquad \lambda=\frac{2E}{\hbar\omega} \tag{4.2}$$

として式 (4.1) を書き直すと

$$\left(\frac{d^2}{d\xi^2}+(\lambda-\xi^2)\right)u(\xi)=0 \tag{4.3}$$

となり，これを解く事になる．ここで最も重要な条件が境界条件である，これは

$$u(\pm\infty) = 0 \tag{4.4}$$

である．また $\xi \to \pm\infty$ では

$$u(\xi) \sim e^{-\frac{1}{2}\xi^2} \tag{4.5}$$

であることが簡単に確かめられるので

$$u(\xi) = f(\xi)e^{-\frac{1}{2}\xi^2} \tag{4.6}$$

とおいて $f(\xi)$ に対する微分方程式に書き直すのである．これは

$$\frac{d^2f}{d\xi^2} - 2\xi\frac{df}{d\xi} + (\lambda - 1)f = 0 \tag{4.7}$$

となっていて，数学では良く知られている微分方程式である．この解は Hermite 多項式を与えているが，この Hermite の微分方程式は

$$\frac{d^2H_n}{d\xi^2} - 2\xi\frac{dH_n}{d\xi} + 2nH_n = 0 \tag{4.8}$$

となっている．従って，式 (4.7)(4.8) を比較すると

$$\lambda = 2n + 1 \tag{4.9}$$

が求まる．$\lambda = \frac{2E}{\hbar\omega}$ なので

$$E = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right) \tag{4.10}$$

となり，調和振動子のエネルギー固有値が求まっている．

4.1.2 微分方程式の発散解

式 (4.3) を解くと実は

$$u(\xi) \sim e^{\frac{1}{2}\xi^2} \tag{4.11}$$

と言う発散する解が混じっている．微分方程式を FORTRAN プログラムで解こうとした場合，必ずこの解が混じりその処理に難渋するものである．

4.2 母関数

ここで母関数について簡単に解説しよう．これは確かに非常に便利なものである．しかし母関数をどうやって探し，求めたのかと言う問題は難しすぎて良く分からない．いずれにしても，例えば Hermite 多項式を与える母関数を使うと様々な問題が簡単に解けてしまう事が良くあるものである．ここで Hermite 多項式 $H_n(\xi)$ を導出する母関数は

$$S(\xi, x) \equiv e^{-x^2+2\xi x} \tag{4.12}$$

である．これを使うと，

$$e^{-x^2+2\xi x} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} H_n(\xi) x^n \tag{4.13}$$

と書ける事が知られている．この時，$e^{-x^2+2\xi x} = e^{-(x-\xi)^2+\xi^2}$ に注意すると

$$H_n(\xi) = (-)^n e^{\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2} \tag{4.14}$$

と表されることが簡単に示すことができる．また次の恒等式も証明されている．

$$\frac{dH_n}{d\xi} = 2nH_{n-1} \tag{4.15}$$

$$H_{n+1} = 2\xi H_n - 2nH_{n-1} \tag{4.16}$$

これらより $H_n(\xi)$ が式 (4.8) を満たしている事がわかる．

4.3 生成・消滅演算子 $(a^\dagger,\ a)$

調和振動子の問題は代数的に解く事ができる．このためにオペレータ $a^\dagger$, a を次のように導入するのである．

$$a^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} x - \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}} \hat{p}, \qquad a = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} x + \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}} \hat{p} \tag{4.17}$$

何故，代数的に解けてしまうのかと言う事をきちんと理解することはかなり重要であるが，ここではまずは解く事を考えて行こう．まず，演算子を導入したわけなので，その状態関数を定義する必要がある．それで真空状態 $|0>$ として

$$a\,|0>= 0 \tag{4.18}$$

としよう．これが代数的手法の出発点である．最も大切な代数関係式は

$$[a, a^\dagger] = 1 \tag{4.19}$$

である．さらに number オペレータ $\hat{N}$ を

$$\hat{N} = a^\dagger a \tag{4.20}$$

と定義しよう．また $\hat{N}$ の固有関数を $|n>$ としてその固有値を n とすると

$$\hat{N}|n>= n|n> \tag{4.21}$$

となっている．一方，代数関係式として

$$[\hat{N}, a] = -a, \quad \Rightarrow \quad \hat{N}a = a(\hat{N}-1), \qquad [\hat{N}, a^\dagger] = a^\dagger, \quad \Rightarrow \quad \hat{N}a^\dagger = a^\dagger(\hat{N}+1) \tag{4.22}$$

が示される．これより

$$\hat{N}\big(a^\dagger|n>\big) = (n+1)\big(a^\dagger|n>\big), \qquad \hat{N}\big(a|n>\big) = (n-1)\big(a|n>\big), \tag{4.23}$$

となっている．従って，状態 $\big(a^\dagger|n>\big)$,　$\big(a|n>\big)$ も $\hat{N}$ の固有関数である．すなわち

$$a^\dagger|n>= \sqrt{n+1}|n+1>, \quad a|n>= \sqrt{n}|n-1> \tag{4.24}$$

である．但し，係数は規格化より求めている．この式 (4.24) は物理的には非常に重要な意味を持っている．それは $a^\dagger$ とは量子数 n を一つ増やすオペレータになっていて，a は量子数 n を一つ減らすオペレータになっていると言う事実である．さらに，n は $n = 0, 1, 2, \cdots$, の整数であることがわかる．これらの $a^\dagger$,　a は生成・消滅演算子と言われている．

4.4　$a^\dagger$,　a による調和振動子の固有値

調和振動子の Hamiltonian を $a^\dagger$,　a で書くと

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 = \hbar\omega\left(a^\dagger a + \frac{1}{2}\right) \tag{4.25}$$

となる．従って，エネルギー固有値は

$$E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right), \qquad n = 0, 1, 2\cdots \tag{4.26}$$

となっている．

4.5 何故，$a^\dagger$, a で解けたのか？

この代数的な手法では境界条件を考慮していない．通常は最も重要な条件として $\psi(\pm\infty)=0$ と言う境界条件を入れる事によってエネルギーが求められている．しかしここではその条件を何処にも入れてはいない．

それでも解く事が出来たのは何故だろうか？これは散乱状態が存在していないと言う事と関係している．つまりは粒子はポテンシャルに閉じ込められているので無限遠方で波動関数がゼロと言う条件が必要ないのである．従って，これは量子力学の模型としては特異なものである．様々な模型計算や特殊な方法で調和振動子のエネルギーが求められているが，しかしこれはその模型計算の是非を必ずしも検証し，その手法を肯定しているとは言えない事に注意する必要がある．すなわち，調和振動子の特殊性で偶然，旨く解けた場合が良く見られるからである．その典型例が経路積分による計算である．

4.6 反交換関係の $a_p^\dagger$, a_p

量子力学の演習では出てこないが，場の理論を勉強していると必ず出てくるのが反交換関係の $a_p^\dagger$, a_p である．すなわちこれらの演算子に

$$\{a_p^\dagger, a_q\} = \delta_{p,q}, \quad \{a_p^\dagger, a_q^\dagger\} = 0, \quad \{a_p, a_q\} = 0 \tag{4.27}$$

と言う交換関係を仮定するものである．この $a_p^\dagger$, a_p は p の運動量を持つフェルミオンを記述する演算子に対応している．真空 $|0>$ に $a_p^\dagger$ をオペレートすると

$$a_p^\dagger|0>=|\psi_p> \tag{4.28}$$

として p の運動量を持つフェルミオンが生成されると言うものである．勿論，

$$a_p|0>=0 \tag{4.29}$$

である．この場合，number オペレータ $\hat{N}_p$ も

$$\hat{N}_p = a_p^\dagger a_p, \qquad \hat{N}_p|n_p>=n_p|n_p> \tag{4.30}$$

となっている．ここで $a_p^\dagger$, a_p の反交換関係を使い，$a_p a_p = 0$ に注意すると

$$\hat{N}_p\hat{N}_p|n_p>=n_p\hat{N}_p|n_p>=n_p^2|n_p>=a_p^\dagger(1-a_p^\dagger a_p)a_p|n_p>=\hat{N}_p|n_p>=n_p|n_p> \tag{4.31}$$

となり，n_p は 0 か１である事がわかる．これは Pauli 原理を意味している．

第5章　量子力学演習問題　NO. 5

この章は３次元の Schrödinger 方程式を扱うための準備となる章である．特に，ポテンシャルが $V(r)$ と r だけの関数である中心力が重要であるため，∇^2 を極座標表示することが必須事項となっている．そして，これはそう簡単にできるものではない．しかしながら，一度，その計算を行ったら，後は覚えてしまう事も重要であろう．

5.1　極座標

古典力学でも重力は中心力であるため，運動方程式を極座標表示に変換する事は重要であった．そしてこの場合，Lagrangian で書くと比較的簡単に極座標表示での運動方程式が求められたものである．しかし量子力学では残念ながら，簡単な方法は知られていない．まずは ∇ の極座標表示から始めよう．これは

$$\boldsymbol{\nabla} = \boldsymbol{e}_r \frac{\partial}{\partial r} + \boldsymbol{e}_\theta \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial \theta} + \boldsymbol{e}_\varphi \frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial \varphi} \tag{5.1}$$

と書かれている．次に ∇^2 を計算して行くが，これはそう簡単ではない．まずは基底の直交性を書いて置こう．すなわち

$$(\boldsymbol{e}_r \cdot \boldsymbol{e}_\theta) = (\boldsymbol{e}_\theta \cdot \boldsymbol{e}_\varphi) = (\boldsymbol{e}_r \cdot \boldsymbol{e}_\varphi) = 0 \tag{5.2}$$

が成り立っている．ここで単位ベクトルの微分は

$$d\boldsymbol{e}_r = \boldsymbol{e}_\theta d\theta + \sin\theta\ \boldsymbol{e}_\varphi d\varphi \tag{5.3}$$

$$d\boldsymbol{e}_\theta = -\boldsymbol{e}_r d\theta + \cos\theta\ \boldsymbol{e}_\varphi d\varphi \tag{5.4}$$

$$d\boldsymbol{e}_\varphi = -\sin\theta\ \boldsymbol{e}_r d\varphi - \cos\theta\ \boldsymbol{e}_\theta d\varphi \tag{5.5}$$

となっている．一方，微分の定義から

$$\begin{aligned} d\boldsymbol{e}_r &= \frac{\partial \boldsymbol{e}_r}{\partial r}dr + \frac{\partial \boldsymbol{e}_r}{\partial \theta}d\theta + \frac{\partial \boldsymbol{e}_r}{\partial \varphi}d\varphi & (5.6) \\ d\boldsymbol{e}_\theta &= \frac{\partial \boldsymbol{e}_\theta}{\partial r}dr + \frac{\partial \boldsymbol{e}_\theta}{\partial \theta}d\theta + \frac{\partial \boldsymbol{e}_\theta}{\partial \varphi}d\varphi & (5.7) \\ d\boldsymbol{e}_\varphi &= \frac{\partial \boldsymbol{e}_\varphi}{\partial r}dr + \frac{\partial \boldsymbol{e}_\varphi}{\partial \theta}d\theta + \frac{\partial \boldsymbol{e}_\varphi}{\partial \varphi}d\varphi & (5.8) \end{aligned}$$

であり，これと単位ベクトルの微分の式を比較して偏微分の関係式が求まる．結果を書いておくと

$$\begin{aligned} \frac{\partial \boldsymbol{e}_r}{\partial r} &= 0, \quad \frac{\partial \boldsymbol{e}_r}{\partial \theta} = \boldsymbol{e}_\theta, \quad \frac{\partial \boldsymbol{e}_r}{\partial \varphi} = \sin\theta\,\boldsymbol{e}_\varphi & (5.9) \\ \frac{\partial \boldsymbol{e}_\theta}{\partial r} &= 0, \quad \frac{\partial \boldsymbol{e}_\theta}{\partial \theta} = -\boldsymbol{e}_r, \quad \frac{\partial \boldsymbol{e}_\theta}{\partial \varphi} = \cos\theta\,\boldsymbol{e}_\varphi & (5.10) \\ \frac{\partial \boldsymbol{e}_\varphi}{\partial r} &= 0, \quad \frac{\partial \boldsymbol{e}_\varphi}{\partial \theta} = -\sin\theta\,\boldsymbol{e}_r, \quad \frac{\partial \boldsymbol{e}_\varphi}{\partial \varphi} = -\cos\theta\,\boldsymbol{e}_\varphi & (5.11) \end{aligned}$$

となっている．これらを使って ∇^2 を計算すればよい．

5.1.1 極座標表示の単位ベクトルの時間微分

ここで単位ベクトルの微分の公式についてコメントしておこう．これは力学における単位ベクトルの時間微分を求める時に出てきた公式である．これは

$$\begin{aligned} \frac{d\boldsymbol{e}_r}{dt} &= \boldsymbol{e}_\theta\left(\frac{d\theta}{dt}\right) + \sin\theta\ \boldsymbol{e}_\varphi\left(\frac{d\varphi}{dt}\right) & (5.12) \\ \frac{d\boldsymbol{e}_\theta}{dt} &= -\boldsymbol{e}_r\left(\frac{d\theta}{dt}\right) + \cos\theta\ \boldsymbol{e}_\varphi\left(\frac{d\varphi}{dt}\right) & (5.13) \\ \frac{d\boldsymbol{e}_\varphi}{dt} &= -\sin\theta\ \boldsymbol{e}_r\left(\frac{d\varphi}{dt}\right) - \cos\theta\ \boldsymbol{e}_\theta\left(\frac{d\varphi}{dt}\right) & (5.14) \end{aligned}$$

と書かれていた．ここで dt を外せば，単位ベクトルの微分の公式が求まっている．

5.2 ∇^2 の極座標表示

この計算がかなり大変なものである事は上記の議論で明らかであろう．しかしそれでも一度は計算して置く必要があると思う．∇^2 は

$$\boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{\nabla} = \left(\boldsymbol{e}_r\frac{\partial}{\partial r} + \boldsymbol{e}_\theta\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta} + \boldsymbol{e}_\varphi\frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)\cdot\left(\boldsymbol{e}_r\frac{\partial}{\partial r} + \boldsymbol{e}_\theta\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta} + \boldsymbol{e}_\varphi\frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) \tag{5.15}$$

である．ところが単位ベクトル $\boldsymbol{e}_r,\ \boldsymbol{e}_\theta,\ \boldsymbol{e}_\varphi$ が $\theta,\ \varphi$ の関数になっている．従って，この微分を実行する必要があるため，計算が複雑になっている．しかしこれは ”straightforward but cumbersome” であり，地道にやればできる問題である．ここではその結果を書いておこう．これは

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} \tag{5.16}$$

と書かれている．今後はこの式を覚える事にしよう．

5.3 変数分離

３次元における Schrödinger 方程式は

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\boldsymbol{r}) + V(r)\psi(\boldsymbol{r}) = E\psi(\boldsymbol{r}) \tag{5.17}$$

である．ここで $V(r)$ は中心力ポテンシャルを考えている．∇^2 の極座標表示の式から，この Schrödinger 方程式は変数分離型になっている．従って，$\psi(\boldsymbol{r}) = u(r)Y(\theta,\varphi)$ とおいて $u(r),\ Y(\theta,\varphi)$ に対する方程式を求めると

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{d}{dr}\right) + \frac{\lambda}{r^2}\right]u(r) + V(r)u(r) = Eu(r) \tag{5.18}$$

$$\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]Y(\theta,\varphi) = \lambda Y(\theta,\varphi) \tag{5.19}$$

となる．

5.4 角度 $(\theta,\ \varphi)$ 部分の方程式

まずは角度 $(\theta,\ \varphi)$ に依存している方程式を調べて行こう．これは

$$\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]Y(\theta,\varphi)=\lambda Y(\theta,\varphi) \tag{5.20}$$

であった．この微分方程式は変数分離型になっている．従って $Y(\theta,\varphi)=f(\theta)g(\varphi)$ とおくと

$$\left(\frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d}{d\theta}\right)-\frac{\nu}{\sin^2\theta}\right)f(\theta) = \lambda f(\theta) \tag{5.21}$$

$$\left(\frac{d^2}{d\varphi^2}+\nu\right)g(\varphi) = 0 \tag{5.22}$$

となる．

5.4.1 φ の微分方程式

まず，式 (5.22) から解いて行こう．この時，$g(\varphi)$ が $L_z=-i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}$ の固有関数であることを要求する．

$$L_z g(\varphi)=m\,g(\varphi),\qquad (m=0,\ \pm1,\cdots) \tag{5.23}$$

ここで m は粒子の質量の表記で使われているが，これは群論でよく使われる notation なのでここでも採用している．しかし混乱はないとは思う．この式 (5.23) は

$$-i\hbar\frac{\partial g(\varphi)}{\partial\varphi}=m\,g(\varphi) \tag{5.24}$$

であり，これは簡単に解けて，

$$g(\varphi)=Ne^{i\frac{m}{\hbar}\varphi} \tag{5.25}$$

の形になっている．勿論，式 (5.22) の解は式 (5.25) の形になっている．この場合，直ちに

$$\nu=m^2 \tag{5.26}$$

である事がわかる．

5.4.2 θ の微分方程式

次に，式 (5.21) を解く事になる．

$$\left(\frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d}{d\theta}\right)-\frac{m^2}{\sin^2\theta}\right)f(\theta)=\lambda f(\theta) \tag{5.27}$$

ここで，新しい変数として $x=\cos\theta$ を導入すると，微分方程式 (5.27) は

$$\frac{d}{dx}\left((1-x^2)\frac{dF(x)}{dx}\right)-\frac{m^2}{1-x^2}F(x)+\lambda F(x)=0 \tag{5.28}$$

となる．但し，$f(\theta)=F(x)$ としている．この微分方程式は Legendre の陪微分方程式として良く知られているものである．従って，固有値 λ は

$$\lambda=\ell(\ell+1), \quad (\ell=0,1,2,\cdots) \tag{5.29}$$

となっている．この場合，Legendre の陪微分方程式の解は

$$F(x)=P_\ell^m(x)=(1-x^2)^{\frac{1}{2}|m|}\,\frac{d^{|m|}}{dx^{|m|}}\,P_\ell(x) \tag{5.30}$$

と書かれている．ここで $P_\ell(x)$ は Legendre 関数で

$$P_\ell(x)=\frac{1}{2^\ell\ell!}\,\frac{d^\ell}{dx^\ell}(x^2-1)^\ell \tag{5.31}$$

である．また，この母関数は

$$\frac{1}{\sqrt{1-2xt+t^2}}=\sum_{\ell=0}^{\infty}P_\ell(x)\,t^\ell \tag{5.32}$$

で与えられている．

5.5　角運動量 $\boldsymbol{L}$

角運動量 L は

$$\boldsymbol{L} = \boldsymbol{r} \times \boldsymbol{p} = -i\hbar \boldsymbol{r} \times \boldsymbol{\nabla} \tag{5.33}$$

である．ここで ∇ の極座標表示は

$$\boldsymbol{\nabla} = \boldsymbol{e}_r \frac{\partial}{\partial r} + \boldsymbol{e}_\theta \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial \theta} + \boldsymbol{e}_\varphi \frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial \varphi} \tag{5.34}$$

である．これより

$$\boldsymbol{L} = -i\hbar \left[\frac{\partial}{\partial \theta}\boldsymbol{e}_\varphi - \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial \varphi}\boldsymbol{e}_\theta \right] \tag{5.35}$$

となる．基底の変換は

$$\mathbf{e}_\varphi = -\sin\varphi\ \mathbf{e}_x + \cos\varphi\ \mathbf{e}_y \tag{5.36}$$

$$\mathbf{e}_\theta = \cos\theta\cos\varphi\ \mathbf{e}_x + \cos\theta\sin\varphi\ \mathbf{e}_y - \sin\theta\ \mathbf{e}_z \tag{5.37}$$

なので，これより L_x, L_y, L_z を極座標で表示する．その結果

$$L_+ = L_x + iL_y = \hbar e^{i\varphi}\left(\frac{\partial}{\partial \theta} + i\cot\theta\, \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \tag{5.38}$$

$$L_- = L_x - iL_y = \hbar e^{-i\varphi}\left(-\frac{\partial}{\partial \theta} + i\cot\theta\, \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \tag{5.39}$$

$$L_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} \tag{5.40}$$

となっている．また L^2 は

$$\boldsymbol{L}^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2 = L_- L_+ + L_z^2 + \hbar L_z \tag{5.41}$$

と書く事ができるので，これより L^2 は

$$\boldsymbol{L}^2 = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial \theta}\left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial \theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] \tag{5.42}$$

となる．これより， Hamiltonian $H = \dfrac{\boldsymbol{p}^2}{2m} + V(r)$ **を角運動量 L を使って書き直すと**

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\boldsymbol{L}^2}{2mr^2} + V(r) \tag{5.43}$$

となる．

5.6　L^2 の固有値

L^2 の固有値を比較的簡単に求められる手法を紹介しよう．但し，L^2 の固有関数は $Y_{\ell m}(\theta,\varphi)$ であるとしている．まず

$$\boldsymbol{\nabla}^2=\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}=\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r}-\frac{\boldsymbol{L}^2}{\hbar^2r^2} \tag{5.44}$$

である．ここで $f_\ell(x,y,z)$ を

$$f_\ell(x,y,z)=(ax+by+cz)^\ell,\qquad \ell=0,1,2,\cdots \tag{5.45}$$

とする．この時，

$$\Delta f_\ell(x,y,z)=0 \tag{5.46}$$

を満たすように $a,\ b,\ c$ を選ぶ．これは

$$a^2+b^2+c^2=0 \tag{5.47}$$

であればよい．この時，$f_\ell(x,y,z)$ は L^2 の固有関数に比例しているので

$$f_\ell(x,y,z)=C_\ell\,r^\ell\,Y_\ell(\theta,\varphi) \tag{5.48}$$

と書く事ができる．C_ℓ は定数である．これより

$$\left[\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r}-\frac{\boldsymbol{L}^2}{\hbar^2r^2}\right]f_\ell(x,y,z)=0 \tag{5.49}$$

となる．これは (5.48) を代入して計算すれば

$$\boldsymbol{L}^2Y_\ell(\theta,\varphi)=\hbar^2\ell(\ell+1)Y_\ell(\theta,\varphi) \tag{5.50}$$

となっている．これは，確かに L^2 の固有値が求まった事になっている．

第6章　量子力学演習問題　NO. 6

この章では角運動量 $\boldsymbol{L}$ を代数的に解く方法を学ぶ事になっている．$\boldsymbol{L}$ は

$$L_x = i\hbar\left(z\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial z}\right) \tag{6.1}$$

$$L_y = i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial x}\right) \tag{6.2}$$

$$L_z = i\hbar\left(y\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial y}\right) \tag{6.3}$$

であるが，これには

$$[L_x, L_y] = i\hbar L_z, \quad [L_y, L_z] = i\hbar L_x, \quad [L_z, L_x] = i\hbar L_y \tag{6.4}$$

の関係式がある．この時

$$[\boldsymbol{L}^2, L_x] = 0, \quad [\boldsymbol{L}^2, L_y] = 0, \quad [\boldsymbol{L}^2, L_z] = 0 \tag{6.5}$$

が成り立っている．

6.1　$\boldsymbol{L}^2$ の固有値と固有関数

ここでは代数的な手法により，L^2 の固有値と固有関数を求めて見よう．この固有関数 $Y_{\ell m}(\theta,\varphi)$ は

$$Y_{\ell m}(\theta,\varphi) = f_{\ell m}(\theta)\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\varphi} \tag{6.6}$$

の形になっている．従って

$$L_z Y_{\ell m}(\theta,\varphi) = \hbar m Y_{\ell m}(\theta,\varphi) \tag{6.7}$$

である．これが代数的な手法の出発点の式である．また

$$L_\pm = L_x \pm iL_y \tag{6.8}$$

を導入しよう．この時，

$$[L_z, L_\pm] = \pm\hbar L_\pm \tag{6.9}$$

が簡単に示される．これより

$$L_z\big(L_\pm Y_{\ell m}(\theta,\varphi)\big) = \hbar(m\pm 1)\big(L_\pm Y_{\ell m}(\theta,\varphi)\big) \tag{6.10}$$

が示される．これは $L_\pm Y_{\ell m}(\theta,\varphi)$ も L_z の固有関数である事を意味している．よって

$$L_\pm Y_{\ell m}(\theta,\varphi) = kY_{\ell,m\pm 1}(\theta,\varphi) \tag{6.11}$$

が成り立っている．ここで k は定数である．

6.1.1　L^2 の固有値

ここで L^2 の固有値を求めて見よう．まず

$$L_-L_+ = \boldsymbol{L}^2 - L_z^2 - \hbar L_z \tag{6.12}$$

を $Y_{\ell\ell}(\theta,\varphi)$ にオペレートすると $L_+Y_{\ell\ell}(\theta,\varphi) = 0$ なので

$$\boldsymbol{L}^2 Y_{\ell\ell}(\theta,\varphi) = \hbar^2\ell(\ell+1)Y_{\ell\ell}(\theta,\varphi) \tag{6.13}$$

が求まる．これは L^2 の固有値が $\hbar^2\ell(\ell+1)$ である事を示している．

6.1.2　L^2 の固有関数

次に L^2 の固有関数のうち，簡単に計算できるものを求めてみよう．まず

$$L_+Y_{\ell\ell}(\theta,\varphi) = 0 \tag{6.14}$$

を用いて具体的に書くと

$$\frac{df_{\ell\ell}(\theta)}{d\theta} - \ell\cot\theta f_{\ell\ell}(\theta) = 0 \tag{6.15}$$

となる．この微分方程式は直ちに解けて

$$f_{\ell\ell}(\theta) = N_\ell \sin^\ell\theta \tag{6.16}$$

となる．

6.1.3　$L_\pm$ の行列要素

$L_\pm$ の行列要素を計算しよう．まず，$\boldsymbol{L}^2$ は L_+, L_- を使って

$$\boldsymbol{L}^2 = L_+L_- + L_z^2 - \hbar L_z \tag{6.17}$$

と書ける．この時，$Y_{\ell m}(\theta,\varphi)$ により上式の期待値をとると

$$\hbar^2\ell(\ell+1) = < Y_{\ell,m}|L_+|Y_{\ell,m-1} >< Y_{\ell,m-1}|L_-|Y_{\ell,m} > + \hbar^2 m^2 - \hbar^2 m \tag{6.18}$$

となる．ここで

$$< Y_{\ell,m}|L_+|Y_{\ell,m-1} >^* = < Y_{\ell,m-1}|L_-|Y_{\ell,m} > \tag{6.19}$$

に注意すると

$$< Y_{\ell,m}|L_x + iL_y|Y_{\ell,m-1} > = \hbar\sqrt{(\ell-m+1)(\ell+m)} \tag{6.20}$$
$$< Y_{\ell,m-1}|L_x - iL_y|Y_{\ell,m} > = \hbar\sqrt{(\ell-m+1)(\ell+m)} \tag{6.21}$$

と求まる．

6.2　空間回転と角運動量

空間の回転と角運動量が密接に関連している．ここでは　$z-$ 軸の回転を考える．点 $P(x,y,z)$ を $z-$ 軸の回りに θ だけ回転すると，点 $P'(x',y',z')$ になり，これは

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\theta & -\sin\theta & 0 \\ \sin\theta & \cos\theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \tag{6.22}$$

と書かれる．この時，関数 $\Psi(x,y,z)$ は $\Psi'(x,y,z)$ になり，

$$\Psi'(x,y,z) = U_\theta \Psi(x,y,z) = \Psi(x',y',z') \tag{6.23}$$

と書かれている．この時 U_θ を回転オペレータと呼んでいる．ここで微小回転 $\theta << 1$ を考えると

$$\Psi(x',y',z') = \Psi(x - y\theta, y + x\theta, z) \tag{6.24}$$

とおいて，θ が十分小さいとして Taylor 展開しよう．よって

$$U_\theta = 1 - \theta\left(y\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial y}\right) + \cdots = 1 + \frac{i\theta}{\hbar}L_z + \cdots \tag{6.25}$$

と求まる．ここで

$$L_z = i\hbar\left(y\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial y}\right) \tag{6.26}$$

を使っている．また，有限の角度 θ の回転は $\frac{\theta}{n}$ を n 回転させて

$$U_\theta = \left(1 + \frac{i\theta}{n\hbar}L_z\right)^n \tag{6.27}$$

とする．そしてこの n を十分大きくすると

$$U_\theta = \lim_{n\to\infty}\left(1 + \frac{i\theta}{n\hbar}L_z\right)^n = e^{\frac{i\theta}{\hbar}L_z} \tag{6.28}$$

と求まり，有限角度の回転となる．これは $\frac{\alpha}{n} \ll 1$ の時

$$\lim_{n\to\infty}\ln\left(1 + \frac{\alpha}{n}\right)^n = \lim_{n\to\infty} n\,\ln\left(1 + \frac{\alpha}{n}\right) \simeq n \times \frac{\alpha}{n} = \alpha \tag{6.29}$$

式 (6.29) が成り立っている事から，式 (6.28) が求められている．

6.2.1　状態関数の回転

この U_θ が状態関数を回転させるオペレータである．従って

$$\Psi'(x,y,z) = e^{\frac{i\theta}{\hbar}L_z}\,\Psi(x,y,z) \tag{6.30}$$

と書かれている．この演算子 $U_\theta = e^{\frac{i\theta}{\hbar}L_z}$ はユニタリー演算子となっている．

第7章　量子力学演習問題　NO. 7

この章では質量 m の粒子の3次元 Schrödinger 方程式を解いてエネルギー固有値を求めて行く事になる．自然界におけるポテンシャルは基本的には中心力である．このため，ここではこの中心力ポテンシャルに束縛された質量 m の粒子のエネルギー固有値を計算して行く．

7.1　中心力ポテンシャル

量子力学の応用で最も重要な問題が水素原子のスペクトルの計算である．この場合，ポテンシャルは中心力である．従って，まずは質量 m の粒子が中心力ポテンシャルに束縛されている問題を解いて行く事になる．この場合，3次元 Schrödinger 方程式は

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r}+\frac{\boldsymbol{L}^2}{2mr^2}+V(r)\right)\psi(\boldsymbol{r})=E\psi(\boldsymbol{r}) \tag{7.1}$$

である．ここで

$$\psi(\boldsymbol{r})=\frac{u(r)}{r}Y_{\ell m}(\theta,\varphi) \tag{7.2}$$

とおいて式 (7.1) に代入すると

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dr^2}+\frac{\hbar^2\ell(\ell+1)}{2mr^2}+V(r)\right)u(r)=Eu(r) \tag{7.3}$$

となる．

7.1.1　$s-$ 波

量子力学では $\ell=0$ の事を $s-$ 波と呼んでいる．また $\ell=1$ は $p-$ 波である．そのような呼び方が一般的になっている限り，それを覚える事が重要である．

基底状態は常に $s-$ 波の状態になっている．これは式 (7.3) を見れば明らかであろう．角運動量に依存している項は斥力的に振舞っているからである．$s-$ 波の状態ではその斥力がゼロであるから当然，この状態が最も低いエネルギー状態となっている．

7.2 重心運動と相対運動

粒子の束縛問題を考えるとこれは必ず，２体問題以上である事がわかる．１体問題は自由粒子しか存在できない事は明らかであろう．ここでは孤立系の２体問題を考えよう．今，質量 m_1 と m_2 の2つの粒子がポテンシャル $V(|\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2|)$ で相互作用している系を考えよう．この Hamiltonian は

$$H = \frac{\boldsymbol{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\boldsymbol{p}_2^2}{2m_2} + V(|\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2|) \tag{7.4}$$

で与えられる．この系を重心座標と相対座標で書くと

$$H = \frac{\boldsymbol{P}^2}{2M} + \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m} + V(r) \tag{7.5}$$

となる． ただし，

$$\boldsymbol{R} = \frac{m_1\boldsymbol{r}_1 + m_2\boldsymbol{r}_2}{m_1 + m_2}, \qquad \boldsymbol{r} = \boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2 \tag{7.6}$$

であり，P, p はその共役運動量である．また，全質量 M と換算質量 m は

$$M = m_1 + m_2 \quad (\text{全質量}), \qquad m = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \quad (\text{換算質量}) \tag{7.7}$$

である．この時，

$$\boldsymbol{p}_1 = \boldsymbol{p} + \frac{m_1}{M}\boldsymbol{P}, \quad \boldsymbol{p}_2 = -\boldsymbol{p} + \frac{m_2}{M}\boldsymbol{P} \tag{7.8}$$

である．

7.3 水素原子

水素原子の方程式を具体的に解いて行こう．水素原子は陽子に電子が束縛されている状態である．この場合，２体問題であるが，陽子は電子よりも約２０００倍重いため，その換算質量はほぼ，電子の質量と考えても大きな間違いをする事はない．その重心運動は自由粒子の運動なのでここでは考える必要はない．

水素型原子における電子の Schrödinger 方程式は

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\boldsymbol{L}^2}{2mr^2} - \frac{Ze^2}{r}\right)\psi(\boldsymbol{r}) = E\psi(\boldsymbol{r}) \tag{7.9}$$

となる． Z は原子核の電荷である．ここで，

$$\psi(\boldsymbol{r}) = \frac{u(r)}{r} Y_{\ell m}(\theta, \varphi) \tag{7.10}$$

とおいて，動径部分の波動方程式を求めると，

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2mr^2} - \frac{Ze^2}{r} \right) u(r) = Eu(r) \tag{7.11}$$

となる．ここで，波動関数に対する境界条件は

$$u(\infty) = 0, \quad u(0) = 0 \tag{7.12}$$

である．動径部分の波動関数 $u(r)$ に対しては原点での正則性を要求する事になる．新しい変数として

$$\rho = 2\sqrt{\frac{2m|E|}{\hbar^2}}, \qquad \epsilon = \sqrt{\frac{me^4}{2\hbar^2|E|}} \tag{7.13}$$

を導入する．この場合，式 (7.11) は

$$\frac{d^2 u(r)}{d\rho^2} - \left\{ \frac{1}{4} + \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2} - \frac{\epsilon Z}{\rho} \right\} u(r) = 0 \tag{7.14}$$

となる．この微分方程式を解けばエネルギー固有値 ϵ が求まる．

7.3.1 級数展開による解放

この方程式を級数展開により解いて行こう．まず

$$u(\rho) = e^{-\rho/2} \rho^{\ell+1} L(\rho) \tag{7.15}$$

とおいて $L(\rho)$ に対する微分方程式

$$\rho L'' + \{(2(\ell+1) - \rho\} L' + (\epsilon Z - \ell - 1) L = 0 \tag{7.16}$$

を級数展開で解く．まず

$$L(\rho) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \rho^n \tag{7.17}$$

を微分方程式に代入し ρ **の各べきの係数をゼロとおくと**

$$(\epsilon Z - \ell - 1 - n)a_n + \{2(n+1)(\ell+1) + n(n+1)\}a_{n+1} = 0 \tag{7.18}$$

が求まる．ここで，ρ **が十分大きい振る舞いを見ると，これは級数展開で** n **の大きいところに対応している． 十分大きい** n **では式 (7.18) から**

$$a_n \simeq \frac{1}{n!} \tag{7.19}$$

と求まる．しかしこれだと式 (7.17) から

$$L(\rho) \simeq \sum^{\infty} \frac{1}{n!}\,\rho^n = e^{\rho} \tag{7.20}$$

となってしまい，式 (7.15) から $u(\rho)$ **が**

$$u(\rho) = e^{-\rho/2}\rho^{\ell+1}L(\rho) \simeq \rho^{\ell+1}e^{\rho/2} \tag{7.21}$$

となり，これは境界条件 $u(\infty) = 0$ **と矛盾する．これを避けるためには式 (7.18) で級数が切れる必要がある．すなわち，**

$$\epsilon Z - \ell - 1 - n_r = 0 \tag{7.22}$$

となる事が必要条件となっている．n_r **の表記は式 (7.18) の級数が切れる場所の** n **を示している．これより**

$$E_n = -\frac{mZ^2e^4}{2\hbar^2n^2} \tag{7.23}$$

となる．但し，$n \equiv n_r + \ell + 1$ **としている．**

7.3.2 束縛エネルギー E_n

水素原子の束縛エネルギー E_n **の状態依存性は** n_r **が** $n_r = 0, 1, 2\cdots$ **となるので次のようになっている．**

$$\begin{array}{lllll}
n_r = 0 & \ell = 0 & \longrightarrow & n = 1 & \textbf{1s-状態} \\
n_r = 0 & \ell = 1 & \longrightarrow & n = 2 & \textbf{2p-状態} \\
n_r = 1 & \ell = 0 & \longrightarrow & n = 2 & \textbf{2s-状態} \\
n_r = 0 & \ell = 2 & \longrightarrow & n = 3 & \textbf{3d-状態} \\
n_r = 1 & \ell = 1 & \longrightarrow & n = 3 & \textbf{3p-状態} \\
n_r = 2 & \ell = 0 & \longrightarrow & n = 3 & \textbf{3s-状態}
\end{array}$$

7.3.3 エネルギー E_n の縮退度

水素原子の状態は n_r だけではなく $Y_{\ell m}(\theta, \varphi)$ の量子数 m によっても指定されている．しかし，エネルギー E_n は量子数 m には直接，依存してはいない．従って n で指定される状態の縮退度が

$$\sum_{\ell=0}^{n-1}(2\ell+1) = n^2 \tag{7.24}$$

となっている．

第8章　量子力学演習問題　NO. 8

この章では水素型原子の様々な性質を議論することになる．例えば，水素原子の基底状態の束縛エネルギーは 13.6 eV であると言う事は，一度計算したらその数値を覚えておくことが大切である．またその波動関数が

$$\psi(\boldsymbol{r})_{n\ell m} = R_{n\ell}(r) Y_{\ell m}(\theta, \varphi) \tag{8.1}$$

の形になっていると言う事も覚えておいた方が良い．

8.1　水素型原子の性質

水素型原子のエネルギー固有値は

$$E_n = -\frac{mZ^2e^4}{2\hbar^2 n^2}, \qquad (n = 1, 2, \cdots) \tag{8.2}$$

で与えられる．何故，水素型として Z を入れて置くのかと言う事を不思議に思うかもしれないが，実はこの方が覚えやすいと言う事もある．それと実際，水素型の原子，すなわち Z が大きい原子核に１個の電子が束縛されている状態の水素型原子も観測されている．

8.1.1　水素原子の基底状態のエネルギー

水素原子の基底状態のエネルギーは電子の質量が $m = 0.511 \mathrm{MeV}/\mathbf{c}^2$ なので

$$E_1 = -\frac{me^4}{2\hbar^2} = -\frac{1}{2}mc^2\alpha^2 = -0.5 \times 0.511 \times 10^6 \times \left(\frac{1}{137}\right)^2 = -13.6 \quad \mathrm{eV} \tag{8.3}$$

である．ここで $\alpha = \frac{1}{137}$ は fine structure constant (微細構造定数) である．

8.1.2 水素型原子の基底状態の波動関数

水素型原子の基底状態の波動関数は $1s$ 状態であり

$$R_{1s}(r) = \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} 2e^{-\frac{Zr}{a_0}} \tag{8.4}$$

$$Y_{00}(\theta,\varphi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \tag{8.5}$$

である．この Bohr 半径は

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2} = 0.529 \times 10^{-8}\ \mathrm{cm} \tag{8.6}$$

である．この波動関数の特徴として，原点においてもその存在確率

$$|R_{1s}(0)|^2 = \frac{1}{\pi}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^3 \tag{8.7}$$

は有限であると言う点である．これは実際の現象で良く現れるものであり，記憶しておく必要がある．

8.1.3 ns の波動関数 $\psi_{ns}(\boldsymbol{r})$

実際問題として，ns でもその波動関数の原点の存在確率 $|\psi_{ns}(0)|^2$ は有限である．多電子系の原子を考えると ns 状態がかなり低く出てきている．これは原点近くでは原子核の引力が働いて，このため原点近くに存在確率をもつ ns 状態は引力を稼ぐためである．そして外側には多くの電子が存在しているが，これらとは斥力なのでここでエネルギーを稼ぐことは出来ない．参考のため，$2s$ の波動関数を書いておこう．

$$R_{2s}(r) = \frac{1}{2\sqrt{2}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}}\left(2 - \frac{Zr}{a_0}\right)e^{-\frac{Zr}{2a_0}}, \qquad Y_{00}(\theta,\varphi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \tag{8.8}$$

この式でも $|R_{2s}(0)|^2$ は有限値である．

8.2 一般化された角運動量

一般的に角運動量 J をその交換関係だけで定義する事ができる．この場合，軌道角運動量そのものではないが，性質は全く同じである．その定義式とは

$$[J_x, J_y] = iJ_z, \quad [J_y, J_z] = iJ_x, \quad [J_z, J_x] = iJ_y \tag{8.9}$$

である．この節では $\hbar$ を書いていないが，これらの議論に必要ないからである．

ここでこの J が依存すべき変数に関しては議論しないが，基本的には粒子 (質点) の座標の関数になっていると考えてよい．但し，今後，スピンを考える事になるがスピンは座標 r に直接には依存してはいない．しかしそれが質点の座標の implicit な関数である事は認識しておく必要がある．このスピンの出所が Dirac 方程式の解である波動関数に依存してるからであり，これらの波動関数は当然，座標に依存している．もう少し具体的に言うと，これらは演算子でありそれ自身が独立して物理的な意味を持つと言う存在ではない．波動関数にオペレートして初めて観測量が得られるのである．

8.2.1 $\boldsymbol{J}^2$, J_z の固有関数と固有値

ここで J^2 を

$$\boldsymbol{J}^2 = J_x^2 + J_y^2 + J_z^2 \tag{8.10}$$

で定義しよう．この時，

$$[\boldsymbol{J}^2, J_z] = 0 \tag{8.11}$$

が簡単に示すことができる．従って，これは J^2, J_z の同時固有関数を作る事ができる事を示している．これらを

$$\boldsymbol{J}^2|JM> = \alpha|JM> \tag{8.12}$$

$$J_z|JM> = M|JM> \tag{8.13}$$

としよう．但し，以降は $|M\rangle \equiv |JM\rangle$ と表記しよう．この場合

$$\langle M|J_z|M'\rangle = M\delta_{MM'} \tag{8.14}$$

となる．ここで $J_\pm$ を

$$J_\pm = J_x \pm iJ_y \tag{8.15}$$

で定義しよう．この時，簡単な計算で

$$[J_z, J_\pm] = \pm J_\pm \tag{8.16}$$

が示される．ここでこの式 $\boxed{J_z J_\pm - J_\pm J_z = \pm J_\pm}$ **を状態** $|M\rangle,\ |M'\rangle$ **で挟むと**

$$\langle M|J_z J_\pm - J_\pm J_z|M'\rangle = \pm\langle M|J_\pm|M'\rangle \tag{8.17}$$

となる．これを書き直すと

$$(M - M' \mp 1)\langle M|J_\pm|M'\rangle = 0 \tag{8.18}$$

である．これより $\boxed{M' = M \mp 1}$ **以外では**

$$\langle M|J_\pm|M'\rangle = 0 \tag{8.19}$$

であることがわかる．よってゼロでない行列要素を

$$\langle M|J_+|M-1\rangle \;=\; A \tag{8.20}$$
$$\langle M|J_-|M+1\rangle \;=\; B \tag{8.21}$$

として $A,\ B$ **を求めて行く．一方，**

$$J_- J_+ = \boldsymbol{J}^2 - J_z^2 - J_z = |J_+|^2 \geq 0 \tag{8.22}$$

である．ここで $-J \leq M \leq J$ **を考慮すると，この式から**

$$\langle J|J_- J_+|J\rangle = \langle J|\boldsymbol{J}^2 - J_z^2 - J_z|J\rangle = \langle J|\boldsymbol{J}^2|J\rangle - J(J+1) = 0 \tag{8.23}$$

が求まる．これより

$$\langle J|\boldsymbol{J}^2|J\rangle = J(J+1) \tag{8.24}$$

が得られる．すなわち $\alpha = J(J+1)$ **であったので式 (8.12) は**

$$\boldsymbol{J}^2|JM> \;=\; J(J+1)|JM> \tag{8.25}$$
$$J_z|JM> \;=\; M|JM> \tag{8.26}$$

となっている

8.2.2 $J_\pm$ の行列要素

次に $J_\pm$ の行列要素 ($\langle M|J_+|M-1\rangle$ と $\langle M|J_-|M+1\rangle$) を求めてみよう．簡単な計算で

$$[J_+, J_-] = 2J_z \tag{8.27}$$

を示すことができる．この式を $|M\rangle$ の状態で挟むと

$$|\langle M-1|J_-|M\rangle|^2 - |\langle M|J_-|M+1\rangle|^2 = 2M \tag{8.28}$$

が得られる．ここで $\boxed{F(M) \equiv |\langle M-1|J_-|M\rangle|^2}$ と定義すると式 (8.28) は

$$F(M) - F(M+1) = 2M \tag{8.29}$$

となる．この式から任意の k に対して

$$F(M) - F(M+k) = 2Mk + k(k+1) \tag{8.30}$$

が成り立つ事が示される．これは数列の問題を解くのと同じような手法により求めることができる．ここで $\boxed{k = J - M + 1}$ とおくと

$$F(M) - F(J+1) = (J-M+1)(J+M) \tag{8.31}$$

となる．今，$F(J+1) = 0$ なので，結局

$$\langle M-1|J_-|M\rangle = \sqrt{(J-M+1)(J+M)} \tag{8.32}$$

が求まる．同様に

$$\langle M+1|J_+|M\rangle = \sqrt{(J-M)(J+M+1)} \tag{8.33}$$

となっている．但し，このルートの前に現れる位相は無視している．

8.3　スピン

電子の状態を記述するためにはスピンの自由度を

$$\psi(\boldsymbol{r}, m_\sigma) = u(\boldsymbol{r})\chi_{m_\sigma} \tag{8.34}$$

として考慮する必要がある．ここでスピンの波動関数 χ_{m_σ} は

$$\chi_{\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \qquad \chi_{-\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \tag{8.35}$$

で与えられる．m_σ は $\frac{1}{2},\ -\frac{1}{2}$ をとっている．このスピンは Dirac 方程式から導かれているので Schrödinger 方程式には手で入れるしか方法はない．スピンオペレータ s は Pauli 行列 $\boldsymbol{\sigma}$ により

$$\boldsymbol{s} = \frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\sigma} \tag{8.36}$$

と書かれている．固有値方程式は

$$\boldsymbol{s}^2\chi_{m_\sigma} = s(s+1)\hbar^2\,\chi_{m_\sigma} = \frac{3}{4}\hbar^2\,\chi_{m_\sigma} \tag{8.37}$$

$$s_z\chi_{m_\sigma} = m_\sigma\hbar\,\chi_{m_\sigma}, \quad \left(m_\sigma = \frac{1}{2},\ -\frac{1}{2}\right) \tag{8.38}$$

となっている．この場合，座標依存性がないように見えるが，実際には状態関数にオペレートして初めて意味を持っているので勿論，座標依存性は常に考える必要がある．

8.4 2電子系のスピン

2電子系のスピンの波動関数を作ろう．この場合，1の電子のスピンオペレータを $\boldsymbol{s}_1$ その固有関数を $\chi_{m_1}^{(1)}$ とし，2の電子のスピンオペレータを $\boldsymbol{s}_2$ その固有関数を $\chi_{m_2}^{(2)}$ としよう．この1，2の表記が座標を表していると考えてよい．この場合，全体の合成スピン $\boldsymbol{S}$ は $\boldsymbol{S} = \boldsymbol{s}_1 + \boldsymbol{s}_2$ である．

8.4.1 $\boldsymbol{S}^2$, S_z の固有関数

$\boldsymbol{S}^2$, S_z の固有値方程式は

$$\boldsymbol{S}^2 \Psi_{S,M_s} = S(S+1)\hbar^2 \Psi_{S,M_s} \tag{8.39}$$

$$S_z \Psi_{S,M_s} = M_s \hbar \Psi_{S,M_s} \tag{8.40}$$

である．ここで S^2, S_z の固有関数を書いておこう．これら2電子系の固有関数は

$$\Psi_{1,1} = \chi_{\frac{1}{2}}^{(1)} \chi_{\frac{1}{2}}^{(2)} \tag{8.41}$$

$$\Psi_{1,-1} = \chi_{-\frac{1}{2}}^{(1)} \chi_{-\frac{1}{2}}^{(2)} \tag{8.42}$$

$$\Psi_{1,0} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\chi_{\frac{1}{2}}^{(1)} \chi_{-\frac{1}{2}}^{(2)} + \chi_{-\frac{1}{2}}^{(1)} \chi_{\frac{1}{2}}^{(2)} \right] \tag{8.43}$$

$$\Psi_{0,0} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\chi_{\frac{1}{2}}^{(1)} \chi_{-\frac{1}{2}}^{(2)} - \chi_{-\frac{1}{2}}^{(1)} \chi_{\frac{1}{2}}^{(2)} \right] \tag{8.44}$$

と書かれている．これらの状態関数に対して S^2, S_z の固有値は

$$\boldsymbol{S}^2 \Psi_{1,1} = 2\Psi_{1,1}, \quad S_z \Psi_{1,1} = \Psi_{1,1} \tag{8.45}$$

$$\boldsymbol{S}^2 \Psi_{1,-1} = 2\Psi_{1,-1}, \quad S_z \Psi_{1,-1} = -\Psi_{1,-1} \tag{8.46}$$

$$\boldsymbol{S}^2 \Psi_{1,0} = 2\Psi_{1,0}, \quad S_z \Psi_{1,0} = 0 \tag{8.47}$$

$$\boldsymbol{S}^2 \Psi_{0,0} = 0, \quad S_z \Psi_{0,0} = 0 \tag{8.48}$$

となっている．

8.4.2　2電子系スピン固有関数の対称性

電子のスピン１，２を入れ替える演算子を P_{12} として

$$P_{12} f(x_1, x_2) = f(x_2, x_1) \tag{8.49}$$

により定義する．また，

$$\begin{aligned} P_{12} f_s(x_1, x_2) &= f_s(x_1, x_2) \qquad (\text{symmetric}) && (8.50) \\ P_{12} f_a(x_1, x_2) &= -f_a(x_1, x_2) \quad (\text{anti}-\text{symmetric}) && (8.51) \end{aligned}$$

の時，$f_s(x_1, x_2)$ は対称，$f_a(x_1, x_2)$ は反対称と言う．２電子系の固有関数 Ψ_{S,M_s} には P_{12} オペレータに対する対称性がある．これは

$$P_{12} \Psi_{1,M_s} = \Psi_{1,M_s} \tag{8.52}$$

$$P_{12} \Psi_{0,0} = -\Psi_{0,0} \tag{8.53}$$

となっている．すなわち，スピン１の２電子系は対称，スピン０の２電子系は反対称となっている．これには理由がある．それは P_{12} と $\boldsymbol{S} = \boldsymbol{s}_1 + \boldsymbol{s}_2$ が交換しているからである．すなわち

$$P_{12} \boldsymbol{S} P_{12}^{-1} = \boldsymbol{S}, \qquad \Rightarrow \qquad [P_{12}, \boldsymbol{S}] = 0 \tag{8.54}$$

である．よって，S と P_{12} は同時固有関数を持っている．この事は多電子原子系の状態を計算する場合に，Pauli と関連して重要になる．例えば，２電子系を考えると実現される状態の波動関数は必ず，全体で反対称になっている必要がある．このため，電子がとる軌道が制限される事になっている．

第9章　量子力学演習問題　NO. 9

この章では量子力学における摂動論の問題を解いて行く事になる．Hamiltonian を厳密に解ければ摂動論は必要ないのであるが，現実問題としては厳密解が知られている模型はほんのわずかである．この事からも摂動論の重要性が理解できるものと思われる．

9.1　摂動論の基礎

全 Hamiltonian が

$$H = H_0 + H' \tag{9.1}$$

で与えられる系を考える．この時，H' は H_0 に比べて十分小さいものとして，摂動で扱う．但し，H_0 の固有値と固有関数はわかっているものとする．すなわち，

$$H_0 \Psi_n^{(0)} = E_n^{(0)} \Psi_n^{(0)} \tag{9.2}$$

であり，$\Psi_n^{(0)}$ は規格直交系を形成していてエネルギーの縮退はないとする．従って

$$< \Psi_n^{(0)} | \Psi_m^{(0)} >= \delta_{nm} \tag{9.3}$$

である．今， $H = H_0 + \lambda H'$ として λ を導入する．この時，Schrödinger 方程式

$$H\Psi = E\Psi, \qquad \Rightarrow \qquad (H_0 + \lambda H')\Psi = E\Psi \tag{9.4}$$

の E と Ψ を λ のベキで展開すると

$$E = E_0 + \lambda E_1 + \lambda^2 E_2 + \cdots \tag{9.5}$$

$$\Psi = \Psi_0 + \lambda \Psi_1 + \lambda^2 \Psi_2 + \cdots \tag{9.6}$$

となる．ここで，それぞれの λ のベキを比較する事により，

$$H_0 \Psi_0 = E_0 \Psi_0 \tag{9.7}$$

$$H_0 \Psi_1 + H' \Psi_0 = E_0 \Psi_1 + E_1 \Psi_0 \tag{9.8}$$

$$H_0 \Psi_2 + H' \Psi_1 = E_0 \Psi_2 + E_1 \Psi_1 + E_2 \Psi_0 \tag{9.9}$$

と求まる．ここで λ は後で $\lambda = 1$ とすればよい．一般的に言ってこの λ の導入に違和感を覚える学生が少なくないが，H' の大きさを表すための道具であると言う認識ができれば納得できるものと思われる．勿論，λ に物理的な意味はない．

9.1.1 摂動論の戦略

摂動論による計算の基礎は，摂動を受けた波動関数 Ψ_1 を非摂動の波動関数 $\Psi_n^{(0)}$ で記述すると言う戦略である．従って，まずは Ψ_1 を $\Psi_n^{(0)}$ で

$$\Psi_1 = \sum_n c_n^{(1)} \Psi_n^{(0)} \tag{9.10}$$

と展開することにより基底状態の１次の摂動エネルギーを求めてみよう．これは式 (9.8) を $\Psi_0^{(0)}$ で期待値を取ると

$$E_1 = < \Psi_0^{(0)} | H' | \Psi_0^{(0)} > \tag{9.11}$$

となる．この場合，展開係数 $c_n^{(1)}$ は

$$c_n^{(1)} = \frac{< \Psi_n^{(0)} | H' | \Psi_0^{(0)} >}{E_0^{(0)} - E_n^{(0)}}, \qquad (n \neq 0) \tag{9.12}$$

と求まる．次に，２次の摂動エネルギーを求めるために，Ψ_2 を

$$\Psi_2 = \sum_n c_n^{(2)} \Psi_n^{(0)} \tag{9.13}$$

と展開する．この時，基底状態に対する２次の摂動エネルギー E_2 は

$$E_2 = -\sum_{n \neq 0} \frac{| < \Psi_n^{(0)} | H' | \Psi_0^{(0)} > |^2}{E_n^{(0)} - E_0^{(0)}} \tag{9.14}$$

と求まる．この２次の摂動エネルギー E_2 は常に負となっている．これは明らかで，$E_n^{(0)} > E_0^{(0)}$ である事に依っている．この事は覚えておく必要があろう．

9.1.2 摂動論に慣れる

摂動論の計算に関しては，ここで解説する意味はそれ程，ないと考えている．読者には，ともかくこの演習問題を自分で解くと言う事に尽きる．１回目にできなくても，２回目，３回目に自分で解ければそれで良いのでまずは計算をすると言う事であろう．

9.2 Zeeman 効果

量子力学においては Zeeman 効果を生み出す摂動 Hamiltonian が現れている．この場合，磁場を B とする時，

$$H' = -\frac{e}{2m}(\boldsymbol{L} + \boldsymbol{\sigma}) \cdot \boldsymbol{B} \tag{9.15}$$

となっている．この項は Dirac の Hamiltonian を非相対論にして行く過程で現われるものである．この式の導出はそれ程，大変ではないのでここで簡単に解説しておこう．

9.2.1 Zeeman 効果の Hamiltonian

電子と電磁場が相互作用している系は量子電磁力学の Lagrangian 密度によって記述されている．この系を非相対論近似をして電子と電磁場が相互作用している Hamiltonian を求める事が出来る．この過程はかなり大変であるが，その結果は比較的簡単な形で表現する事が出来ている．非相対論的量子力学において荷電粒子と電磁場の Hamiltonian は

$$H = \frac{1}{2m}\left[\boldsymbol{\sigma} \cdot (\hat{\boldsymbol{p}} - e\boldsymbol{A})\right]^2 - \frac{Ze^2}{r} \tag{9.16}$$

となっている．但し，σ は Pauli 行列である．また A はベクトルポテンシャルである．式 (9.16) の最後の項はクーロンポテンシャルを表している．また，$\hat{p}$ が演算子 ($\hat{\boldsymbol{p}} = -i\nabla$) である事に注意して次の数学の恒等式

$$\left[\boldsymbol{\sigma} \cdot (\hat{\boldsymbol{p}} - e\boldsymbol{A})\right]^2 = (\hat{\boldsymbol{p}} - e\boldsymbol{A})^2 - ie\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\boldsymbol{p}} \times \boldsymbol{A}$$

を用いて Hamiltonian を書き直すと

$$H = \frac{1}{2m}\hat{\boldsymbol{p}}^2 - \frac{e}{m}\hat{\boldsymbol{p}} \cdot \boldsymbol{A} + \frac{e^2}{2m}\boldsymbol{A}^2 - \frac{Ze^2}{r} - \frac{e}{2m}\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{B} \tag{9.17}$$

となる．この右辺の σ に依っている項がスピンの Zeeman 効果に対応する相互作用である．ここで一様磁場の場合を仮定しよう．この時，

$$\boldsymbol{A} = \frac{1}{2}\boldsymbol{B} \times \boldsymbol{r} \tag{9.18}$$

なので，式 (9.17) は A^2 項とクーロン項は省略すると

$$H = \frac{1}{2m}\hat{\boldsymbol{p}}^2 - \frac{e}{2m}\boldsymbol{L} \cdot \boldsymbol{B} - \frac{e}{2m}\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{B} + \cdots \tag{9.19}$$

となる．これが Zeeman 項の Hamiltonian である．

9.2.2 水素原子の Zeeman 分裂エネルギー

一様な弱い磁場の中に置かれた水素原子のエネルギー準位の分裂エネルギーを計算してみよう．但し，磁場の方向は $z-$ 軸方向としよう．ここでスピンの自由度をいれた $1s_{\frac{1}{2}}$ 電子の波動関数は

$$\psi(\boldsymbol{r}, m_\sigma) = u_{1s}(\boldsymbol{r})\chi_{m_\sigma} \tag{9.20}$$

なので，この場合，Zeeman 分裂エネルギーは１次の摂動論の式から

$$\begin{aligned} E_1 &= <\Psi_0^{(0)}|H'|\Psi_0^{(0)}> = -\frac{eB}{2m}\Big[< u_{1s}(\boldsymbol{r})\chi_{m_\sigma}|(L_z + 2s_z)|u_{1s}(\boldsymbol{r})\chi_{m_\sigma}>\Big] &(9.21)\\ &= -\frac{eBm_\sigma}{m}, \qquad \left(m_\sigma = \pm\frac{1}{2}\right) &(9.22)\end{aligned}$$

となる．ここで Zeeman 分裂エネルギー ΔE は $m_\sigma = -\frac{1}{2}$ と $m_\sigma = \frac{1}{2}$ の時のエネルギー差なので

$$\Delta E = \frac{eB}{m} \tag{9.23}$$

となっている．

第10章　量子力学演習問題　NO. 10

この章では変分法について学ぶ事になる．変分法とは波動関数 $\psi(\boldsymbol{r})$ の形をあらかじめ仮定して，その波動関数で考えている Hamiltonian H の期待値を取る．

$$E = \frac{< \psi|H|\psi >}{< \psi|\psi >} \tag{10.1}$$

そして波動関数 $\psi(\boldsymbol{r})$ の中に入っているパラメータを変える事によって，この E を最小にすると言うものである．

変分法の応用範囲は広くて，しかも非常に useful である．特に，エネルギーだけを求めたい場合，この方法は予想以上に良い答えを出すことが証明されている．

10.1　変分法とは

変分法の基本は関数形を少し変える事により，例えばエネルギーの極小値を探してこの値をより正確に求めると言う手法である．この場合，エネルギーが最小値になるように変分パラメータを選ぶことになる．

関数形を少し変えて式 (10.1) を最小にする作業を厳密に行ってみよう．これは $\psi \to \psi + \delta\psi$ として元の E との差を計算する．すなわち

$$\delta E = \frac{< \psi + \delta\psi|H|\psi >}{< \psi + \delta\psi|\psi >} - \frac{< \psi|H|\psi >}{< \psi|\psi >} \tag{10.2}$$

を $\delta\psi$ の１次まで取って計算してみる．これは

$$\begin{aligned} \delta E &= \frac{< \psi|H|\psi > + < \delta\psi|H|\psi >}{< \psi|\psi >}\left(1 - \frac{< \delta\psi|\psi >}{< \psi|\psi >}\right) \\ &= \frac{1}{< \psi|\psi >}\Big(< \delta\psi|H|\psi > -E < \delta\psi|\psi >\Big) = 0 \end{aligned} \tag{10.3}$$

となる．ここで式 (10.1) を使っている．この式 (10.3) から

$$H|\psi >= E|\psi > \tag{10.4}$$

が求まるが，これは Schrödinger 方程式そのものである．

10.2 何故，変分法が良いのか？

ここでは何故，変分法が良いのか？と言う問題を調べてみよう．これは 問５の問題でもあるが，重要なのでここで解説しておこう．変分法で求めたエネルギー E はその変分波動関数が真の波動関数からずれていても正しい値 E_0 に相当近いものが求められる事を示して行こう．ここで正しい固有関数を ψ_0 としよう．従って

$$H|\psi_0 >= E_0|\psi_0 > \tag{10.5}$$

である．ここで，変分関数 ψ は ψ_0 から

$$\psi = \psi_0 + \varepsilon\psi_1 \tag{10.6}$$

だけずれているとしよう．但し，$\epsilon << 1$ としている．また

$$< \psi_0|\psi_1 >= 0 \tag{10.7}$$

を満たす波動関数 ψ_1 を持ってくるものと仮定しよう．この時，

$$E = \frac{< \psi|H|\psi >}{< \psi|\psi >} \tag{10.8}$$

を ε の 2 次の大きさまで求めると

$$E = E_0 + \varepsilon^2(< \psi_1|H|\psi_1 > -E_0) + \cdots \tag{10.9}$$

となる．この計算で

$$< \psi_0|H|\psi_1 >= E_0 < \psi_0|\psi_1 >= 0 \tag{10.10}$$

を使っている．これより，変分法の計算には ε の 1 次の大きさが出てこない事が示されたのである．すなわち，エネルギーだけを考える限り，波動関数が正しいものから２０%ずれていたとしても，エネルギーは４%程度の誤差範囲で求められる事を示している．

10.2.1 変分関数の選び方

それでは変分関数をどのように選んだらうまくエネルギーが計算できるのであろうか？残念ながら，これには答えることができない．ある程度は経験であろうが，まずは試行錯誤して様々な変分関数を持ってきて計算を試みると言う事であろうか．

10.3 He 原子の基底状態のエネルギー

He 原子には２個の電子が $1s_{\frac{1}{2}}$ 軌道を回っている．この電子の束縛エネルギーを計算する場合，摂動論による計算と比べると変分法による計算は実験値にかなり近い値を与えて驚くほどである．従ってこの計算は必ず，自分で実行する必要がある．但し，相当時間が掛かるしまたなかなか正しい計算結果が出てこない事はまず間違いない事であろう．

10.3.1 He 原子の波動関数

２個の電子は $1s_{\frac{1}{2}}$ 軌道に入っている．この場合，電子の波動関数は全体で反対称になっている必要があるため，スピンで反対称になっている．この波動関数 $\Psi_{He}(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2)$ は

$$\Psi_{He}(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) = \phi_{1s}(r_1)\phi_{1s}(r_2) \times \frac{1}{\sqrt{2}}[\chi_\uparrow^{(1)}\chi_\downarrow^{(2)} - \chi_\uparrow^{(2)}\chi_\downarrow^{(1)}] \tag{10.11}$$

と書かれている．この場合，その Hamiltonian は

$$H = H_1 + H_2 + H_{12} \tag{10.12}$$

$$H_1 = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{1}{r_1^2}\frac{d}{dr_1}r_1^2\frac{d}{dr_1}\right) - \frac{2e^2}{r_1} \tag{10.13}$$

$$H_2 = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{1}{r_2^2}\frac{d}{dr_2}r_2^2\frac{d}{dr_2}\right) - \frac{2e^2}{r_2} \tag{10.14}$$

$$H_{12} = \frac{e^2}{|\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2|} \tag{10.15}$$

で与えられている．ここで変分波動関数として

$$\phi_{1s}(r_1) = N\,e^{-\alpha r_1}, \quad \phi_{1s}(r_2) = N\,e^{-\alpha r_2} \tag{10.16}$$

としよう．これは水素型原子の波動関数である．α が変分パラメータである．

10.4　He 原子のエネルギー計算

He 原子のエネルギー E を求めるには

$$E = \frac{< \Psi_{He}|H|\Psi_{He} >}{< \Psi_{He}|\Psi_{He} >} \tag{10.17}$$

を計算することになる．

10.4.1　$< \Psi_{He}|\Psi_{He} >$ の計算

まずはこの分母から計算しよう．波動関数は

$$\Psi_{He}(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) = N^2 e^{-\alpha(r_1+r_2)} \tag{10.18}$$

なので $< \Psi_{He}|\Psi_{He} >$ は

$$< \Psi_{He}|\Psi_{He} >= N^4 \int e^{-2\alpha(r_1+r_2)} d^3r_1 d^3r_2 = N^4 (4\pi)^2 \left[\frac{2}{(2\alpha)^3}\right]^2 \tag{10.19}$$

となる．

10.4.2　$< \Psi_{He}|H_1 + H_2|\Psi_{He} >$ の計算

次に $< \Psi_{He}|H_1 + H_2|\Psi_{He} >$ の計算を行う．まず

$$\begin{aligned} < \Psi_{He}|H_1|\Psi_{He} > &= (N^2 4\pi)^2 \int_0^\infty e^{-2\alpha r_2} r_2^2 dr_2 & (10.20)\\ &\times \int_0^\infty e^{-\alpha r_1} \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{1}{r_1^2}\frac{d}{dr_1} r_1^2 \frac{d}{dr_1}\right) - \frac{2e^2}{r_1}\right] e^{-\alpha r_1} r_1^2 dr_1 & (10.21)\\ &= (N^2 4\pi)^2 \frac{2}{(2\pi)^3}\left[\frac{\hbar^2}{8m\alpha} - \frac{2e^2\alpha}{4}\right] & (10.22) \end{aligned}$$

となる．これより

$$\frac{< \Psi_{He}|H_1 + H_2|\Psi_{He} >}{< \Psi_{He}|\Psi_{He} >} = 2\left[\frac{\hbar^2}{2m\alpha} - 2e^2\alpha\right] \tag{10.23}$$

と求まる．これは実は水素原子の場合の２倍になっている．

10.4.3　$<\Psi_{He}|H_{12}|\Psi_{He}>$ の計算

次に相互作用の期待値の計算を行う．これは

$$
\begin{aligned}
<\Psi_{He}|H_{12}|\Psi_{He}> &= <\Psi_{He}|\frac{e^2}{|\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2|}|\Psi_{He}> && (10.24)\\
&= e^2N^4\int e^{-2\alpha(r_1+r_2)}\frac{1}{|\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2|}d^3r_1d^3r_2 && (10.25)
\end{aligned}
$$

となる．ここで

$$
\begin{aligned}
d^3r_1d^3r_2 &= 8\pi^2\sin\theta_1 d\theta_1 r_1^2dr_1r_2^2dr_2 && (10.26)\\
\int\frac{\sin\theta_1 d\theta_1}{|\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2|} &= \int_{-1}^{1}\frac{dt}{\sqrt{r_1^2+r_2^2-2r_1r_2\,t}}=\frac{1}{r_1r_2}\Big[r_1+r_2-|r_1-r_2|\Big] && (10.27)
\end{aligned}
$$

より式 (10.28) を計算すると

$$
\begin{aligned}
&<\Psi_{He}|\frac{e^2}{|\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2|}|\Psi_{He}>=8\pi^2e^2N^4\int_0^\infty e^{-2\alpha r_1}r_1dr_1\times\\
&\left[\int_0^{r_1}(r_1+r_2-|r_1-r_2|)e^{-2\alpha r_2}r_2dr_2+\int_{r_1}^{\infty}(r_1+r_2-|r_1-r_2|)e^{-2\alpha r_2}r_2dr_2\right] \quad (10.28)
\end{aligned}
$$

となる．この式 (10.28) の計算は少し面倒であるが，これを実行すると

$$
<\Psi_{He}|\frac{e^2}{|\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2|}|\Psi_{He}>=8\pi^2e^2N^4\times\frac{5}{2^6}\frac{1}{\alpha^5} \quad (10.29)
$$

と求まる．よって

$$
\frac{<\Psi_{He}|\frac{e^2}{|\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2|}|\Psi_{He}>}{<\Psi_{He}|\Psi_{He}>}=\frac{5}{8}e^2\alpha \quad (10.30)
$$

となる．よって，これらより He 原子のエネルギー E は

$$
E=2\left(\frac{\hbar^2}{2m\alpha}-2e^2\alpha\right)+\frac{5}{8}e^2\alpha \quad (10.31)
$$

となる．

10.4.4　E の最小値

ここで E の最小値を求めよう．これは

$$E = \frac{\hbar^2}{m}\left(\alpha - \frac{27\,m\,e^2}{16\,\hbar^2}\right)^2 - \left(\frac{27}{16}\right)^2 \frac{m\,e^4}{\hbar^2} \tag{10.32}$$

となる．これより最小値 E_0 は

$$E_0 = -77.5 \text{ eV} \tag{10.33}$$

となる．これを実験値および摂動計算と比較してみよう．
摂動計算：$E^{(1)} = -74.8$ **eV**
実験値　：$E^{exp} = -78.9$ **eV**
変分計算：$E^{var} = -77.5$ **eV**
となっている．これから見てもわかるように変分計算が予想以上に実験値に近い値を与えている事がわかる．

第11章　量子力学演習問題　NO. 11

この章では量子力学における表示の問題を扱っている．しかしながら，現在は運動量表示そのものに意味があるとは言えない事がわかっている．運動量表示により，調和振動子の問題を解く事が出来たが，これは偶然であった．調和振動子の問題の場合，境界条件を考える必要がない事がないため，運動量表示でも方程式を解いてエネルギー固有値を求める事が出来たのである．

量子力学の基本方程式は Dirac 方程式である．ここでは Dirac による発見的な方程式の導出について解説しよう．しかしこれは第１量子化と言う物理学の体系からは容認できない手法を取り入れている．このため，現代物理の体系から Dirac 方程式の導出を試みる方法を解説しよう．

この章の後半で１次元の散乱問題を解く事になる．散乱問題は経験が豊富になった物理の職人でも，それを解くのは難しいものである．しかし実験と結びつけるには散乱理論を理解している必要がある．その意味でも，ここで時間を掛けてでも散乱の問題を解く事は十分，意味があると考えている．

11.1　運動量表示

１次元の状態関数 $\phi(x)$ の運動量表示 $\tilde{\phi}(p)$ は

$$\tilde{\phi}(p) = \int e^{\frac{i}{\hbar}px}\phi(x)dx \tag{11.1}$$

で定義されている．しかしながら，自由粒子の場合，その状態関数はその固有値である運動量 p によって指定されている．すなわち

$$\phi_p(x) = |p>= \frac{1}{\sqrt{L}}e^{\frac{i}{\hbar}px} \tag{11.2}$$

と書かれている．その意味で式 (11.1) のような運動量表示と言う物理的な意味合いが良く分からいのである．

11.1.1 数表示

調和振動子の時に，生成・消滅演算子 $\hat{a}^\dagger$, $\hat{a}$ を導入して問題を解いている．この場合

$$\hat{n} = \hat{a}^\dagger \hat{a} \tag{11.3}$$

とした数演算子により，状態が指定されていた．これは調和振動子の固有値が n であったことに依っている．例えばエネルギーは $E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})$ と書かれている．従って，生成・消滅演算子 $\hat{a}^\dagger$, $\hat{a}$ の導入の結果，

$$\hat{a}|0> = 0 \tag{11.4}$$

が示されていた．これを数表示から $x-$ 表示に上式を書き直すと，

$$< x|\hat{a}|x >< x|0 > = \left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} x + \frac{\hbar}{\sqrt{2m\hbar\omega}} \frac{\partial}{\partial x} \right) \phi_0(x) = 0 \tag{11.5}$$

となる．ここで，$< x|0 >$ は通常の波動関数 $\phi_0(x)$ と書いている．この微分方程式を解く事により，規格化された波動関数 $\phi_0(x)$ を求めることができる．実際，式 (11.5) を解くと

$$\phi_0(x) = Ne^{-\frac{1}{2}\alpha x^2}, \quad \left(\alpha = \frac{m\omega}{\hbar} \right) \tag{11.6}$$

となる．

11.2 Dirac 方程式の導出

Dirac はまずエネルギーと質量に関するアインシュタインの関係式 (分散関係式) から出発した．$E^2 = m^2c^4 + \boldsymbol{p}^2c^2$ である．ここで，今考えているのは，質量 m を持ち，その運動量が $\boldsymbol{p}$ である質点であり，相互作用は仮定されていない．この時，Dirac はこの分散関係式を因数分解する事にした．それはエネルギーの１次式を得たかったからであるが，これは１次の時間発展が物理的に意味があると言う事をよく理解していたからであろう．このため Dirac はその因数分解を次のように考えたのである．すなわち，行列を考える事により，

$$E^2 - \boldsymbol{p}^2c^2 - m^2c^4 = (E - c\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{\alpha} - mc^2\beta)(E + c\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{\alpha} + mc^2\beta) = 0 \tag{11.7}$$

と因数分解できたのである．ここで，α と β は４行４列の行列であり，具体的には

$$\boldsymbol{\alpha} = \begin{pmatrix} 0 & \boldsymbol{\sigma} \\ \boldsymbol{\sigma} & 0 \end{pmatrix}, \quad \beta = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{11.8}$$

である．ここで σ は Pauli 行列である．従って，Dirac 方程式は因数分解されたうちの一つを取れば十分なので，

$$i\hbar\frac{\partial\Psi(t,\boldsymbol{r})}{\partial t}=\Big(-i\hbar c\boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{\alpha}+mc^2\beta\Big)\Psi(t,\boldsymbol{r}) \tag{11.9}$$

となり，これがフェルミオンを記述する Dirac 方程式となっている．この時，運動量とエネルギーを微分演算子にすると言う『量子化の手法』を採用している．なお，電子がクーロンポテンシャル中を運動する場合，すなわち水素型原子の場合は Dirac 方程式が

$$i\hbar\frac{\partial\Psi(t,\boldsymbol{r})}{\partial t}=\left(-i\hbar c\boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{\alpha}+mc^2\beta-\frac{Ze^2}{r}\right)\Psi(t,\boldsymbol{r}) \tag{11.10}$$

と書かれている．この場合のエネルギー固有値は実験を見事に再現している．

11.2.1 Dirac 方程式と量子化

Dirac の因数分解による方程式の発見は非常に面白いし，歴史的には価値がある事は明らかである．しかしながらこれまで考えられてきた第１量子化と言う概念が意味をなさない事が現在，明らかになっている．その意味では，Dirac の発見的な手法による Dirac 方程式には無理がある．このため，現代物理学の観点からしたら Dirac 方程式を場の理論的に導出したいと考えるのは自然な成り行きである．

11.3 Dirac の Lagrangian 密度の導出

それでは科学史的ではなく，現代物理学の観点から Dirac 方程式を導出することは可能であろうか？ここではその試みを簡単に紹介しよう．この部分は量力演習のレベルを少し超えるが，趣味としての物理演習と考えて貰えば良いと思う．以下の議論では自然単位系 ($\hbar=1,\ c=1$) の表示を取っている．

11.3.1 Maxwell 方程式の Lagrangian 密度

この場合，出発点となる理論が必要である．そしてそれが Maxwell 方程式である．それに加えて Lagrangian 密度のゲージ不変性を原理として行こう．Maxwell 方程式の Lagrangian 密度は

$$\mathcal{L}=-gj_\mu A^\mu-\frac{1}{4}F_{\mu\nu}F^{\mu\nu} \tag{11.11}$$

で与えられる．ここで A^μ はゲージ場であり，また $F_{\mu\nu}$ は場の強さを表していて

$$F_{\mu\nu} = \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu \tag{11.12}$$

である．また，j_μ がフェルミオンカレントである．この場合，運動方程式は

$$\partial_\mu F^{\mu\nu} = g j^\nu \tag{11.13}$$

であるが，これは Maxwell 方程式そのものである．

11.3.2 Lagrangian 密度のゲージ不変性

ところが，式 (11.11) は

$$A^\mu \Rightarrow A^\mu + \partial^\mu \chi \tag{11.14}$$

のゲージ変換に対して不変ではない．それでは，式 (11.11) がゲージ変換に対して不変であるように模型を作る事ができるのであろうか？このためにはフェルミオンカレント j^μ をまず作る必要がある．これは数学的には４成分の状態関数

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix} \tag{11.15}$$

を持ってくれば可能である事がわかっている．この場合，$\psi^\dagger \hat{O} \psi$ は１６個の成分がある．そしてこれらは Lorentz 空間での回転の性質から

$$\begin{cases} \bar{\psi}\psi : & \mathrm{scalar}, \\ \bar{\psi}\gamma_5\psi : & \mathrm{pseudo-scalar}, \\ \bar{\psi}\gamma_\mu\psi : & 4\ \mathrm{component\ vector}, \\ \bar{\psi}\gamma_\mu\gamma_5\psi : & 4\ \mathrm{component\ axial-vector}, \\ \bar{\psi}\sigma_{\mu\nu}\psi : & 6\ \mathrm{component\ tensor}, \end{cases} \tag{11.16}$$

と分類されている．ここで γ_μ 行列は

$$\gamma^\mu = (\gamma^0, \boldsymbol{\gamma}) = (\beta, \beta\boldsymbol{\alpha}) \tag{11.17}$$

として導入されている．

また $\bar{\psi}$ は

$$\bar{\psi} = \psi^\dagger \gamma_0 \tag{11.18}$$

と定義されている．重要な点は４成分のスピノルを考えるとフェルミオンのベクトルカレント j^μ を確かに作る事ができると言う事である．実際，２成分では作れない事が数学的に知られている．これより，次のような Lagrangian 密度を考えればそれをゲージ不変にする事が可能である．すなわち，

$$\mathcal{L} = C_1 \bar{\psi} \partial_\mu \gamma^\mu \psi - g \bar{\psi} \gamma_\mu \psi A^\mu - \frac{1}{4} F_{\mu\nu} F^{\mu\nu} \tag{11.19}$$

である．この Lagrangian 密度が次のようなゲージ変換

$$\begin{cases} A^\mu \longrightarrow A^\mu + \partial^\mu \chi, \\ \psi \longrightarrow e^{-ig\chi} \psi \end{cases} \tag{11.20}$$

に対して不変である事を要求すると

$$C_1 = i \tag{11.21}$$

である事がわかる．さらに質量項を足してもゲージ不変性は影響しないので，結局，Lagrangian 密度は

$$\mathcal{L} = i \bar{\psi} \partial_\mu \gamma^\mu \psi - g \bar{\psi} \gamma_\mu \psi A^\mu - m \bar{\psi} \psi - \frac{1}{4} F_{\mu\nu} F^{\mu\nu} \tag{11.22}$$

と求まる事がわかる．パラメータ $m,\ g$ は勿論，実験的に決められるべき定数である．ここで，場 ψ に対する Lagrange 方程式は

$$\partial_\mu \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu \psi)} \right) = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi} \tag{11.23}$$

なので，Dirac 場の成分 $\psi_i^\dagger$ について Lagrange 方程式を計算すれば Dirac 方程式

$$i \frac{\partial \psi}{\partial t} = \Big[-i \boldsymbol{\nabla} \cdot \boldsymbol{\alpha} + m\beta \Big] \psi \tag{11.24}$$

が求められる．

11.4　１次元の散乱理論

ここでは１次元の散乱理論について簡単な解説を行おう．散乱理論ではその粒子が自由粒子となっていて，基本的にはポテンシャルの壁に衝突して跳ね返されたり，透過したりする現象を扱っている．これは束縛問題と比べてはるかに複雑で難しい問題となっているが，しかし現実問題として，実験結果と結びつけるためには散乱理論を理解する事が必要である．また，理論体系からしても散乱理論は重要な部分となっている．

11.4.1　入射波と散乱波

散乱理論ではまず，入射波 ψ_{in} を考える必要がある．これは

$$\psi_{in} = e^{ikx} \tag{11.25}$$

とする．波動関数 e^{ikx} に規格化定数を入れてもよいが今後の計算では不要なのでこれを省略している．k はエネルギーと

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \tag{11.26}$$

により結びついている．ここで入射フラックス $\boldsymbol{j}_{in}$ を定義しておこう．これは

$$\boldsymbol{j}_{in} = \frac{1}{2mi}\Big[\psi_{in}^\dagger \boldsymbol{\nabla}\psi_{in} - (\boldsymbol{\nabla}\psi_{in}^\dagger)\psi_{in}\Big] \tag{11.27}$$

となっている．１次元の場合，これは

$$j_{in} = \frac{k}{m} \tag{11.28}$$

である．

11.4.2　$\delta(x)$ 関数ポテンシャルによる散乱

ここでは $V(x) = V_0\delta(x)$ ポテンシャルによる散乱を考えよう．この場合，Schrödinger 方程式は

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V_0\delta(x)\psi(x) = E\psi(x) \tag{11.29}$$

である．E は入射エネルギーであり

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \tag{11.30}$$

である．この場合，入射波は

$$\psi_{in} = e^{ikx} \tag{11.31}$$

となっている．Schrödinger 方程式 (11.29) の解は

$$(1) \quad x < 0 \qquad \psi_{x<0}(x) = e^{ikx} + Ae^{-ikx} \tag{11.32}$$

$$(2) \quad x > 0 \qquad \psi_{x>0}(x) = Be^{ikx} \tag{11.33}$$

と書く事ができる．この場合，Ae^{-ikx} は反射波を表していて，Be^{ikx} は透過波を表している．

11.4.3　波動関数の接続条件

この波動関数は $x = 0$ で接続している必要がある．すなわち

$$\psi_{x<0}(0) = \psi_{x>0}(0) \qquad \Rightarrow \qquad 1 + A = B \tag{11.34}$$

である．また微分の接続は Schrödinger 方程式から

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}dx + V_0\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon}\delta(x)\psi(x)dx = E\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon}\psi(x)dx \tag{11.35}$$

よって

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Big(ikB - (ik - ikA)\Big) + V_0 B = 0 \tag{11.36}$$

と求まる．これらより

$$B = \frac{i\hbar^2 k}{mV_0}A, \qquad 1 + A = B \tag{11.37}$$

となる．よって

$$A = -\frac{1}{1-\frac{i\hbar^2 k}{mV_0}} \tag{11.38}$$

$$B = -\frac{i\hbar^2 k}{mV_0}\frac{1}{1-\frac{i\hbar^2 k}{mV_0}} \tag{11.39}$$

と求められる．ここで入射カレント，反射カレントそして透過カレントを書くと

$$\text{入射カレント} \qquad j_{in} = \frac{k}{m} \tag{11.40}$$

$$\text{反射カレント} \qquad j_R = -\frac{k}{m}|A|^2 \tag{11.41}$$

$$\text{透過カレント} \qquad j_T = \frac{k}{m}|B|^2 \tag{11.42}$$

となっている．これより，反射の確率 P_R と透過の確率 P_T は

$$P_R = \left|\frac{j_R}{j_{in}}\right| = |A|^2 = \frac{1}{1+|\frac{\hbar^2 k}{mV_0}|^2} \tag{11.43}$$

$$P_T = \left|\frac{j_T}{j_{in}}\right| = |B|^2 = \left|\frac{\hbar^2 k}{mV_0}\right|^2 \frac{1}{1+|\frac{\hbar^2 k}{mV_0}|^2} \tag{11.44}$$

となっている．反射の確率 P_R と透過の確率 P_T を足したものは

$$P_R + P_T = \frac{1}{1+|\frac{\hbar^2 k}{mV_0}|^2} + \left|\frac{\hbar^2 k}{mV_0}\right|^2 \frac{1}{1+|\frac{\hbar^2 k}{mV_0}|^2} = 1 \tag{11.45}$$

となって，確率は確かに保存している．

第12章　量子力学演習問題　NO. 12

この章では WKB 法 (Wentzel-Kramers-Brillouin) について簡単に解説しよう．このWKB 法は準古典近似と言われている方法で量子論を古典近似する過程で出てくる理論と言えるものである．この WKB 関連の演習問題を実際，解いて見るとその面白さが分かるものと思う．量子力学的にきちんと解けば良いのであるが，現実問題としては難しくて簡単には解けない事もある．さらに予想以上にWKB 法がうまく機能する場合があることは事実である．Sommerfeld の量子化法についても解説しているが，これは難しすぎるかも知れない．後半では，運動量のエルミート性が自由粒子空間では破れている事を解説しよう．これは古い問題提起でもあるが自分で解いて見るのも面白いと思う．

12.1　WKB 法

ここではWKB 法について簡単に解説して行こう．これは準古典近似を散乱理論に応用して，ポテンシャルの山を透過する確率を計算する時に良く使われる手法である．特にトンネル効果の記述に応用されている．

12.1.1　トンネル効果

原子核中でエネルギー E を持った α 粒子がポテンシャルの障壁を超えて原子核から飛び出て行く確率をトンネル効果により計算されている．この場合，α 粒子が障壁とぶつかる点を a とし，突き抜ける点を b としている．この時，トンネル効果の定式化を WKB 法により行う． α 粒子の波動関数は

$$\begin{cases} \psi_1(r) \simeq Ae^{ikr}, & r < a \\ \psi_2(r) \simeq Be^{-\frac{1}{\hbar}\int_a^r \sqrt{2m(V(r)-E)}\,dr}, & a < r < b \\ \psi_3(r) \simeq Ce^{ikr}, & b < r \end{cases} \tag{12.1}$$

と近似的に書く事が出来る．

ここで波動関数の接続を要求すると

$$(i)\quad r = a \qquad Ae^{ika} = B \tag{12.2}$$

$$(ii)\quad r = b \qquad Be^{-\frac{1}{\hbar}\int_a^b \sqrt{2m(V(r)-E)}\,dr} = Ce^{ikb} \tag{12.3}$$

となっている．従って透過確率 P は

$$P = \left|\frac{C}{A}\right|^2 = e^{-\frac{2}{\hbar}\int_a^b \sqrt{2m(V(r)-E)}\,dr} \tag{12.4}$$

と求められる．これが α 粒子のトンネル確率 (崩壊確率) に対応している．

12.1.2 クーロン障壁の透過率

質点がクーロン障壁を抜ける点を a とすると，透過確率 $P(E)$ は

$$P(E) = e^{-\frac{2}{\hbar}\int_a^{r_0} \sqrt{2m(V(r)-E)}\,dr} \tag{12.5}$$

である．ただし r_0 は

$$r_0 = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{E} \tag{12.6}$$

と求まっている．この場合，クーロンポテンシャルは

$$V(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} \tag{12.7}$$

であり，斥力となっている．$Z_1,\ Z_2$ は核融合する原子核の電荷である．まずは積分を実行しよう．これは

$$\int_a^{r_0} \sqrt{2m\left(\frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} - E\right)}\,dr = \sqrt{2mE}\int_a^{r_0} \sqrt{\frac{r_0}{r} - E}\;dr \tag{12.8}$$

$$= \sqrt{2mE}\left\{\frac{\pi r_0}{2} - \left(a\sqrt{\frac{r_0 - a}{a}} + r_0 \sin^{-1}\sqrt{\frac{a}{r_0}}\right)\right\} \tag{12.9}$$

となっている．ここで a は充分小さいので $a \to 0$ として良い．従って，式 (12.9) の最後の項は無視しても充分良い近似である．よって透過確率 $P(E)$ は

$$P(E) = e^{-\frac{\pi Z_1 Z_2 e^2}{\hbar}\sqrt{\frac{2m}{E}}} \tag{12.10}$$

と求められている．これから核融合の起こる断面積 σ は

$$\sigma = \sigma_0 e^{-\frac{\pi Z_1 Z_2 e^2}{\hbar}\sqrt{\frac{2m}{E}}} \tag{12.11}$$

と書く事ができる．ここで σ_0 はこの計算では決まらない定数である．

12.2　Sommerfeld の量子化法

Sommerfeld の量子化法については量子力学演習の問題集には入れてない．その理由としては，この問題を演習問題として解くには難し過ぎると言うことである．しかし，量子力学発展の初期段階では非常に有効な手法であった．特に，クーロンポテンシャルや調和振動子の固有値を求めると，正しいエネルギー準位が求められるのである．これは準古典近似の一つであり，ここで簡単に解説しよう．

12.2.1　Sommerfeld 量子化の規則

まずは１次元の Schrödinger 方程式から出発しよう．

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+V(x)\right]\psi(x)=E\psi(x). \tag{12.12}$$

ここで波動関数が次のような形を持つと仮定しよう．

$$\psi(x)=Ae^{i\frac{S}{\hbar}} \tag{12.13}$$

A は定数である．そしてこの式を $\hbar$ で

$$S=S_0+\hbar S_1+\cdots \tag{12.14}$$

と展開しよう．これを Schrödinger 方程式に入れてみよう．この時，$\hbar$ の０次の項である S_0 に対して

$$\frac{dS_0(x)}{dx}=\pm\sqrt{2m(E-V(x))}. \tag{12.15}$$

と求まる．これは Hamilton-Jacobi の方程式である．よって波動関数 $\psi(x)$ は

$$\psi(x)=Ae^{\pm\frac{i}{\hbar}\int\sqrt{2m(E-V(x))}dx}. \tag{12.16}$$

となる．ここで波動関数が１価であることの条件

$$\oint pdx\equiv\oint\sqrt{2m(E-V(x))}dx=2\pi\hbar n, \qquad (n:\ \text{は整数か半整数}) \tag{12.17}$$

を課すが，これが Sommerfeld の量子化則である．

12.2.2 クーロンポテンシャル ($V(r) = -\frac{Ze^2}{r}$) のエネルギー

Sommerfeld 量子化法によりクーロンポテンシャル ($V(r) = -\frac{Ze^2}{r}$) のエネルギーを計算すると

$$\oint p dr = 2\sqrt{2m|E|}\int_0^{r_0}\sqrt{\frac{r_0 - r}{r}}dr = nh, \qquad \left(\text{但し}, \quad r_0 = \frac{Ze^2}{|E|}\right) \tag{12.18}$$

となる．ここでこの積分を実行して見よう．この場合 $r = r_0 \sin^2\theta$ と置換すると

$$\begin{aligned}\int_0^{r_0}\sqrt{\frac{r_0 - r}{r}}dr &= 2r_0\int_0^{\frac{\pi}{2}}\sqrt{\frac{1-\sin^2\theta}{\sin^2\theta}}\sin\theta\cos\theta d\theta \\ &= \frac{\pi r_0}{2}\end{aligned}$$

と計算できる．従って，クーロンポテンシャルの場合，そのエネルギーは

$$E = -\frac{m(Ze^2)^2}{2\hbar^2 n^2} \tag{12.19}$$

と求まる．これは良く知られている水素型原子の正しいエネルギー固有値となっている．

12.2.3 調和振動子 ($V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$) のエネルギー

次に調和振動子ポテンシャル $V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$ の場合のエネルギーを求めて見よう．この場合，$x_0 = \sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}}$ と置くと Sommerfeld 量子化則は

$$\begin{aligned}\oint p dx &\equiv \int\sqrt{2m(E - V(x))}\,dx = 2m\omega\int_{-x_0}^{x_0}\sqrt{x_0^2 - x^2}\,dx \\ &= 2\pi\hbar n\end{aligned} \tag{12.20}$$

となる．ここで積分を $x = x_0 \sin\theta$ と置換して実行すると

$$\int_{-x_0}^{x_0}\sqrt{x_0^2 - x^2}\,dx = \frac{\pi x_0^2}{2} \tag{12.21}$$

と求まる．これより n は整数か半整数であることが Sommerfeld 量子化法の条件なので，この点を考慮するとエネルギー E は

$$E = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right), \qquad (n = 0, 1, 2, \cdots). \tag{12.22}$$

と求められている．これは確かに調和振動子ポテンシャルの正しいエネルギー固有値となっている．

12.2.4　井戸型ポテンシャルのエネルギー

　１次元の井戸型ポテンシャルは

$$V(x) = \begin{cases} -V_0 & |x| < a \\ 0 & |x| > a \end{cases} \tag{12.23}$$

のポテンシャルである．Sommerfeld 量子化法による計算は

$$\oint p dx \equiv \oint \sqrt{2m(E - V(x))} dx = 2\sqrt{2m(E + V_0)} 2a = 2\pi\hbar n \tag{12.24}$$

となり，これよりエネルギー固有値は

$$E = -V_0 + \frac{\hbar^2 \left(\frac{\pi n}{2}\right)^2}{2ma^2} \tag{12.25}$$

と求められる．これを量子力学の方程式を解いた厳密解と比較して見よう．E は

$$\alpha = \sqrt{\frac{2m\left(E + V_0\right)a^2}{\hbar^2}}, \quad \beta = \sqrt{-\frac{2mEa^2}{\hbar^2}} \tag{12.26}$$

$$\beta = \alpha \tan \alpha \tag{12.27}$$

から求める事ができる．これは数値計算をする以外，簡単には求められないものである．ここでは近似式を求めてみよう．今，

$$\alpha \simeq \frac{\pi}{2} n \tag{12.28}$$

を仮定して見よう．この時，式 (12.26) から

$$E \simeq -V_0 + \frac{\hbar^2 \left(\frac{\pi n}{2}\right)^2}{2ma^2} \tag{12.29}$$

と求められて，これは Sommerfeld 量子化法による計算結果と一致している．しかしながら，この手法には問題点がある．式 (12.28) の仮定は式 (12.27) を満たしてはいないのである．これは Sommerfeld 量子化法が近似的にしか成り立たない手法である事に依っている．

12.3　運動量演算子のエルミート性

　ここでは自由粒子空間での運動量演算子のエルミート性を議論しよう．これ自体は非常に古い話ではあるが，微分演算子のエルミート性について学ぶところが多いと思われる．自由粒子は量子論の中でも特別な振る舞いをしているが，しかし非常に重要でもある．

12.3.1　１次元自由粒子の波動関数

　１次元自由粒子の波動関数

$$u(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ikx} \tag{12.30}$$

に対して周期的境界条件

$$u(x) = u(x+L) \tag{12.31}$$

を課す．この時，k に対する条件を求めると

$$k = \frac{2\pi}{L} n, \qquad n = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots \tag{12.32}$$

となる．

12.3.2　交換関係による量子化条件

　一方，交換関係による量子化条件は

$$\hat{p}x - x\hat{p} = -i\hbar \tag{12.33}$$

であった．この両辺を上で求めた状態関数

$$u_n(x) = |n>= \frac{1}{\sqrt{L}} e^{i\frac{2\pi n}{L}x} \tag{12.34}$$

で期待値をとると

$$< n|\,\hat{p}x - x\hat{p}\,|m >= -i\hbar\delta_{nm} \tag{12.35}$$

となる．

12.3.3　交換関係の矛盾

ここで運動量演算子 $\hat{p}$ のエルミート性を仮定すると

$$(n-m)\frac{2\pi\hbar}{L} < u_n|x|u_m >= -i\hbar\delta_{nm} \tag{12.36}$$

と求まる．式 (12.36) は $n=m$ の時，明らかに矛盾している．この矛盾は運動量演算子 $\hat{p}$ のエルミート性が自由粒子空間においては使えないことに依っている．

12.3.4　自由粒子と運動量のエルミート性

自由粒子状態に対しては，無限遠方で状態関数がゼロにはなっていない．このため，運動量演算子のエルミート性を証明することはできない．しかし交換関係自体は具体的な計算により成り立っている．これは運動量演算子 $\hat{p}$ を単純に微分オペレータとして扱い，計算を行うと示すことができる．すなわち $< n|\hat{p}x|m >$ を計算すると

$$\begin{aligned} < n|\hat{p}x|m > &= -\frac{i\hbar}{L}\int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} e^{-i\frac{2\pi n}{L}x}\frac{d}{dx}\left(xe^{i\frac{2\pi n}{L}x}\right)dx &(12.37)\\ &= -i\hbar\delta_{nm}+ < n|x\hat{p}|m > &(12.38)\end{aligned}$$

となっていて，交換関係は成り立っている．

12.3.5　運動量演算子自体のエルミート性

運動量演算子自体のエルミート性は自由粒子を周期的境界条件の下で解いた場合にも成り立っている．これはこの場合の状態関数が運動量演算子の固有関数となっているからである．しかし一般的には運動量演算子のエルミート性は成り立っていなく，従ってその性質を利用することはできないと言う事である．

前述しているように，一般的な運動量演算子のエルミート性の欠如は自由粒子空間では無限遠方で波動関数がゼロと言う条件を満たしていない事が原因であった．この場合，周期的境界条件を付けると一見，うまく境界条件は考慮されたと考えられるのであるが，しかしながら，一般的な運動量演算子のエルミート性を回復することは出来なかったと言う事であろう．

付 録A　数学公式集

A.1　基本公式

A.1.1　デルタ関数 $\delta(x)$ とクロネッカーデルタ δ_{ij}

- $\delta(x) = \begin{cases} 0 & x \neq 0 \\ \infty & x = 0 \end{cases}$,
- $\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x)dx = 1$
- $\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\delta(x-a)dx = f(a),$
- $\delta(\boldsymbol{r}) \equiv \delta(x)\delta(y)\delta(z)$
- $\delta_{ij} = \begin{cases} 0 & i \neq j \\ 1 & i = j \end{cases}$,
- $\sum_{j=1}^{\infty} \delta_{ij} A_j = A_i$

A.1.2　ベクトルの内積と外積

３次元ベクトルの場合，内積と外積が定義できる．

内積　：　$\boldsymbol{a} \cdot \boldsymbol{b} = a_1 b_1 + a_2 b_2 + a_3 b_3 = |\boldsymbol{a}||\boldsymbol{b}| \cos\theta$

外積　：　$\boldsymbol{a} \times \boldsymbol{b} = \boldsymbol{e}_1(a_2 b_3 - a_3 b_2) + \boldsymbol{e}_2(a_3 b_1 - a_1 b_3) + \boldsymbol{e}_3(a_1 b_2 - a_2 b_1)$

$$(\boldsymbol{a} \times \boldsymbol{b})_i = \sum_{j,k=1}^{3} \epsilon_{ijk} a_j b_k, \quad \text{但し} \quad \epsilon_{ijk} = \begin{cases} 1 & (\text{123 の偶置換}) \\ -1 & (\text{123 の奇置換}) \\ 0 & (\text{それ以外の時}) \end{cases}$$

$$|\boldsymbol{a} \times \boldsymbol{b}| = |\boldsymbol{a}||\boldsymbol{b}| \sin\theta$$

- **単位ベクトルの変換：**

$$\begin{cases} \mathbf{e}_r = \sin\theta\cos\varphi\ \mathbf{e}_x + \sin\theta\sin\varphi\ \mathbf{e}_y + \cos\theta\ \mathbf{e}_z \\ \mathbf{e}_\theta = \cos\theta\cos\varphi\ \mathbf{e}_x + \cos\theta\sin\varphi\ \mathbf{e}_y - \sin\theta\ \mathbf{e}_z \\ \mathbf{e}_\varphi = -\sin\varphi\ \mathbf{e}_x + \cos\varphi\ \mathbf{e}_y \end{cases} \tag{A.1}$$

A.1.3 ベクトルの公式

- $\boldsymbol{a}\cdot(\boldsymbol{b}\times\boldsymbol{c}) = (\boldsymbol{a}\times\boldsymbol{b})\cdot\boldsymbol{c}$
- $\boldsymbol{\nabla}\times(\boldsymbol{\nabla}\times\boldsymbol{A}) = \boldsymbol{\nabla}(\boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{A}) - (\boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{\nabla})\boldsymbol{A}$
- $\boldsymbol{a}\times(\boldsymbol{b}\times\boldsymbol{c}) = (\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{c})\boldsymbol{b} - (\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b})\boldsymbol{c}$
- $\boldsymbol{\nabla}\cdot(\boldsymbol{\nabla}\times\boldsymbol{A}) = (\boldsymbol{\nabla}\times\boldsymbol{\nabla})\cdot\boldsymbol{A} = 0$
- $\boldsymbol{\nabla}\cdot(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B}) = \boldsymbol{B}\cdot(\boldsymbol{\nabla}\times\boldsymbol{A}) - \boldsymbol{A}\cdot(\boldsymbol{\nabla}\times\boldsymbol{B})$
- $(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A})(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B}) = \boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B} + i\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B}$ (**但し** $\boldsymbol{\sigma}$ **はパウリ行列**)

A.1.4 三角関数

三角関数の基本公式をあげておこう．

$$\begin{cases} \sin(x\pm y) = \sin x\cos y \pm \cos x\sin y \\ \cos(x\pm y) = \cos x\cos y \mp \sin x\sin y \\ \tan(x\pm y) = \frac{\tan x\pm\tan y}{1\mp\tan x\tan y} \end{cases} \qquad \begin{cases} \sin 2\theta = 2\sin\theta\cos\theta \\ \sin^2\theta = \frac{1}{2}(1-\cos 2\theta) \\ \cos^2\theta = \frac{1}{2}(1+\cos 2\theta) \end{cases}$$

$$\begin{cases} \sin A + \sin B = 2\sin\frac{A+B}{2}\cos\frac{A-B}{2} \\ \cos A + \cos B = 2\cos\frac{A+B}{2}\cos\frac{A-B}{2} \end{cases}$$

$$a\sin\theta + b\cos\theta = \sqrt{a^2+b^2}\sin(\theta+\alpha), \quad \text{但し} \quad \cos\alpha = \frac{a}{\sqrt{a^2+b^2}}$$

A.1.5 指数関数と対数関数

物理で良く使う対数関数はほとんどすべて，その底が e である．このため $\ln \equiv \log_e$ と定義してこの対数関数のみが対象となっている．

- **基本的な性質：** $e^x \cdot e^y = e^{(x+y)}, \quad (e^x)^y = e^{xy}, \quad e = 2.7182818$
  $\ln xy = \ln x + \ln y, \quad \ln x^y = y \ln x$

- **微分：** $\dfrac{de^x}{dx} = e^x, \qquad \dfrac{d \ln x}{dx} = \dfrac{1}{x}$

A.1.6 テイラー展開

- $e^x = 1 + x + \dfrac{1}{2!}x^2 + \dfrac{1}{3!}x^3 + ... + \dfrac{1}{n!}x^n + ...$
- $\ln(1+x) = x - \dfrac{1}{2}x^2 + \dfrac{1}{3}x^3 - \dfrac{1}{4}x^4 + ...$
- $\sin x = x - \dfrac{1}{3!}x^3 + \dfrac{1}{5!}x^5 + \cdots,$
- $\cos x = 1 - \dfrac{1}{2}x^2 + \dfrac{1}{4!}x^4 + \cdots$
- $e^{ix} = 1 + ix - \dfrac{1}{2}x^2 - i\dfrac{1}{3!}x^3 + \dfrac{1}{4!}x^4 + i\dfrac{1}{5!}x^5 + \cdots = \cos x + i \sin x$

A.2 物理でよく使う積分公式

A.2.1 Exponential の積分

- $\displaystyle\int_0^\infty e^{-\alpha x}dx = \frac{1}{\alpha},$ • $\displaystyle\int_0^\infty xe^{-\alpha x}dx = \frac{1}{\alpha^2},$ • $\displaystyle\int_0^\infty x^2 e^{-\alpha x}dx = \frac{2}{\alpha^3}$
- $\displaystyle\int_0^\infty x^n e^{-\alpha x}dx = (-1)^n \frac{\partial^n}{\partial \alpha^n}\frac{1}{\alpha} = \frac{n!}{\alpha^{n+1}}$

A.2.2 ガウス積分

- $\displaystyle\int_{-\infty}^\infty e^{-\alpha^2 x^2}dx = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha^2}},$ • $\displaystyle\int_{-\infty}^\infty x^2 e^{-\alpha^2 x^2}dx = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{\alpha^6}}$
- $\displaystyle\int_{-\infty}^\infty x^{2n} e^{-\beta x^2}dx = (-1)^n \frac{\partial^n}{\partial \beta^n}\sqrt{\frac{\pi}{\beta}} = \frac{(2n-1)!!\sqrt{\pi}}{2^n \beta^{n+\frac{1}{2}}}$

（但し，$(2n-1)!! = 1 \times 3 \times \cdots \times (2n-1)$）

A.2.3 その他の積分公式

- $\displaystyle\int_{-\infty}^\infty \frac{f(x)dx}{(x^2+a^2)^{\frac{3}{2}}} = \frac{1}{a^2}\int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} f(a\tan\theta)\cos\theta d\theta \qquad (x = a\tan\theta)$
- $\displaystyle\int_{-\infty}^\infty \frac{dx}{(x^2+a^2)^{\frac{3}{2}}} = \frac{2}{a^2},$ • $\displaystyle\int_0^\pi \sin^2\theta d\theta = \int_0^\pi \cos^2\theta d\theta = \frac{\pi}{2}$
- $\displaystyle\int_{-1}^1 \frac{dt}{\sqrt{a+bt}} = \frac{2}{b}\left(\sqrt{|a+b|} - \sqrt{|a-b|}\right)$

A.2.4　n 次元球の体積

半径 R の n 次元球の体積を求めよう．これを I とすると

$$I = \int \cdots \int_{p_1^2 + \cdots p_n^2 \leq R^2} dp_1 \cdots dp_n = \int_0^R p^{n-1} \Omega_n dp = \Omega_n \frac{\Gamma(\frac{n}{2})}{2\alpha^{\frac{n}{2}}} \tag{A.2}$$

と書ける．ここで Ω_n は n 次元の角度積分である．この Ω_n は以下のように求めて行く．まず

$$G = \int_{-\infty}^{\infty} dp_1 \cdots \int_{-\infty}^{\infty} dp_n e^{-\alpha(p_1^2 + \cdots p_n^2)} = \int_0^{\infty} e^{-\alpha p^2} p^{n-1} \Omega_n dp \tag{A.3}$$

を計算する．このガウス積分は直ちに実行できて

$$G = \left(\int_{-\infty}^{\infty} dp e^{-\alpha p^2} \right)^n = \left(\frac{\pi}{\alpha} \right)^{\frac{n}{2}} = \Omega_n \frac{1}{n\alpha^{\frac{n}{2}}} \tag{A.4}$$

となる．これより Ω_n が求まり I は $\boxed{I = \dfrac{\pi^{\frac{n}{2}}}{\Gamma\left(\frac{n}{2}+1\right)} R^n}$ **となる．**

A.3　微分演算公式と座標系

A.3.1　直交座標系　(x, y, z)

- **グラジエント** ∇ :　$$\nabla\phi = \frac{\partial\phi}{\partial x}\boldsymbol{e}_x + \frac{\partial\phi}{\partial y}\boldsymbol{e}_y + \frac{\partial\phi}{\partial z}\boldsymbol{e}_z$$
- **ラプラシアン** Δ :　$$\Delta\phi \equiv \nabla^2\phi = \frac{\partial^2\phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\phi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\phi}{\partial z^2}$$
- **発散** :　$$\mathrm{div}\boldsymbol{A} \equiv \nabla\cdot\boldsymbol{A} = \frac{\partial A_x}{\partial x} + \frac{\partial A_y}{\partial y} + \frac{\partial A_z}{\partial z}$$
- **ローテーション** :

$$\mathrm{rot}\boldsymbol{A} \equiv \nabla\times\boldsymbol{A} = \left(\frac{\partial A_z}{\partial y} - \frac{\partial A_y}{\partial z}\right)\boldsymbol{e}_x + \left(\frac{\partial A_x}{\partial z} - \frac{\partial A_z}{\partial x}\right)\boldsymbol{e}_y + \left(\frac{\partial A_y}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial y}\right)\boldsymbol{e}_z$$

A.3.2　極座標系　(r, θ, φ)

- **グラジエント** :　$$\nabla\phi = \frac{\partial\phi}{\partial r}\boldsymbol{e}_r + \frac{1}{r}\frac{\partial\phi}{\partial\theta}\boldsymbol{e}_\theta + \frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial\phi}{\partial\varphi}\boldsymbol{e}_\varphi$$
- **ラプラシアン** :

$$\nabla^2\phi = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\phi}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\phi}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2\phi}{\partial\varphi^2}$$

- **極座標におけるベクトル**:　$$\boldsymbol{A} = A_r\boldsymbol{e}_r + A_\theta\boldsymbol{e}_\theta + A_\varphi\boldsymbol{e}_\varphi$$

$$\begin{cases} A_r = A_x\sin\theta\cos\varphi + A_y\sin\theta\sin\varphi + A_z\cos\theta \\ A_\theta = A_x\cos\theta\cos\varphi + A_y\cos\theta\sin\varphi - A_z\sin\theta \\ A_\varphi = -A_x\sin\varphi + A_y\cos\varphi \end{cases}$$

- **発散** :　$$\nabla\cdot\boldsymbol{A} = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}(r^2 A_r) + \frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta A_\theta) + \frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial A_\varphi}{\partial\varphi}$$
- **ローテーション**:　$$\nabla\times\boldsymbol{A} = \frac{1}{r\sin\theta}\left(\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta A_\varphi) - \frac{\partial A_\theta}{\partial\varphi}\right)\boldsymbol{e}_r + \frac{1}{r}\left(\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial A_r}{\partial\varphi} - \frac{\partial}{\partial r}(rA_\varphi)\right)\boldsymbol{e}_\theta + \frac{1}{r}\left(\frac{\partial}{\partial r}(rA_\theta) - \frac{\partial A_r}{\partial\theta}\right)\boldsymbol{e}_\varphi$$

A.4　行列

２行２列の正方行列 A **を考えよう．但し，以下の証明は** $n \times n$ **行列で成り立つ．**

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} \tag{A.5}$$

ここで a_{11}，a_{12} **など** (a_{ij} **と書く) を行列の成分という．さらに行列** B

$$B = \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} \\ b_{21} & b_{22} \end{pmatrix} \tag{A.6}$$

を考えよう．２つの行列の足し算はそれぞれの成分同士を足せばよい．

A.4.1　行列の積

２個の行列の掛け算を

$$AB = \begin{pmatrix} a_{11}b_{11} + a_{12}b_{21} & a_{11}b_{12} + a_{12}b_{22} \\ a_{21}b_{11} + a_{22}b_{21} & a_{21}b_{12} + a_{22}b_{22} \end{pmatrix} \tag{A.7}$$

と定義しよう．また成分で書いておく．これは $n \times n$ **行列で成り立つ．**

$$(AB)_{ij} = \sum_{k=1}^{n} a_{ik} b_{kj} \tag{A.8}$$

A.4.2　エルミート行列

行列 A **がエルミート行列であるとは**

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} = A^\dagger \equiv \begin{pmatrix} a_{11}^* & a_{21}^* \\ a_{12}^* & a_{22}^* \end{pmatrix} \tag{A.9}$$

の事である．すなわち， $a_{ij} = a_{ji}^*$ **である．**

A.4.3 エルミート行列の固有値は実数

エルミート行列の固有値方程式を書くと

$$Au = \lambda u, \qquad u = \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix} \tag{A.10}$$

であり，λ が固有値である．この λ が実数である事を示そう．

- 複素数ベクトルの内積： ここで複素数ベクトルの内積を

$$(u, v) \equiv \sum_{i=1,2} u_i^* v_i \tag{A.11}$$

で定義しよう．この時

$$(u, Au) = \sum_{i=1,2} u_i^* \left(\sum_{j=1,2} a_{ij} u_j \right) = \sum_{i=1,2} u_i^* \left(\sum_{j=1,2} a_{ji}^* u_j \right) = \sum_{j=1,2} \left(\sum_{i=1,2} a_{ji} u_i \right)^* u_j$$

とエルミート行列の性質を使って書き直すことができる．これは

$$(u, Au) = (Au, u) \qquad \Rightarrow \qquad \lambda(u, u) = \lambda^*(u, u)$$

となっている．よって $\lambda = \lambda^*$ であり，エルミート行列の固有値 λ は実数である．この議論は $n \times n$ 行列でも成り立つ．

A.4.4 エルミート行列の固有関数の直交性

エルミート行列 A の固有値と固有ベクトルを $\lambda_1,\ u^{(1)}$ と $\lambda_2,\ u^{(2)}$ とすると

$$Au^{(1)} = \lambda_1 u^{(1)}, \qquad Au^{(2)} = \lambda_2 u^{(2)} \tag{A.12}$$

である．ここで $\lambda_1 \neq \lambda_2$ の時 $(u^{(1)}, u^{(2)}) = 0$ の直交性が成り立つ．これは

$$(u^{(1)}, Au^{(2)}) = (Au^{(1)}, u^{(2)}), \qquad \text{よって} \qquad \lambda_2(u^{(1)}, u^{(2)}) = \lambda_1(u^{(1)}, u^{(2)})$$

となっているため，$\lambda_1 \neq \lambda_2$ なので $(u^{(1)}, u^{(2)}) = 0$ が証明されている．

A.4.5 ユニタリー行列

ユニタリー行列 $U = \{u_{ij}\}$ は

$$U^\dagger U = 1$$

を満たす正方行列の事である．これを成分で書くと

$$(U^\dagger U)_{ij} = \sum_{k=1,n} u_{ki}^* u_{kj} = \delta_{ij}$$

となる．今，ベクトル ϕ を $\psi = U\phi$ と変換した時, そのノルム $|\psi|^2$ は

$$\begin{aligned}
|\boldsymbol{\psi}|^2 &\equiv (\boldsymbol{\psi}, \boldsymbol{\psi}) = (U\boldsymbol{\phi}, U\boldsymbol{\phi}) = \sum_{k=1,n} \left(\sum_{i=1,n} u_{ki}^* \phi_i^* \right) \left(\sum_{j=1,n} u_{kj} \phi_j \right) \\
&= \sum_{i=1,n} \sum_{j=1,n} \left(\sum_{k=1,n} u_{ki}^* u_{kj} \right) \phi_i^* \phi_j = \sum_{i=1,n} \sum_{j=1,n} \delta_{ij} \phi_i^* \phi_j = |\boldsymbol{\phi}|^2
\end{aligned}$$

となり不変である．

A.4.6 実対称行列の対角化可能性の証明

実対称行列は常に対角化が可能である．実対称行列はエルミート行列であるため，その固有値は実数である．実対称行列を R，その固有値と規格化された固有ベクトルを κ_1, $\boldsymbol{u}^{(1)}$ および κ_2, $\boldsymbol{u}^{(2)}$ とすると

$$R\boldsymbol{u}^{(1)} = \kappa_1 \boldsymbol{u}^{(1)}, \qquad R\boldsymbol{u}^{(2)} = \kappa_2 \boldsymbol{u}^{(2)} \tag{A.13}$$

となる．ここで $\boldsymbol{u}^{(1)}$, $\boldsymbol{u}^{(2)}$ から作られた行列 U と 対角行列 K を

$$U = (\boldsymbol{u}^{(1)}, \boldsymbol{u}^{(2)}) = \begin{pmatrix} u_1^{(1)} & u_1^{(2)} \\ u_2^{(1)} & u_2^{(2)} \end{pmatrix}, \qquad K = \begin{pmatrix} \kappa_1 & 0 \\ 0 & \kappa_2 \end{pmatrix} \tag{A.14}$$

と定義しよう．この時，式 (A.13) は

$$RU = UK \tag{A.15}$$

とまとめて書く事ができる．この時，行列 U はユニタリー行列なので，式 (A.15) の左から $U^\dagger$ を掛けると

$$U^\dagger R U = K \tag{A.16}$$

となり，確かに実対称行列 R が適当なユニタリー行列により対角化された．

A.5 オペレータの固有値と固有関数

オペレータを $\hat{A}$, 状態を Ψ とすると

$$\hat{A}\Psi = \lambda\Psi \tag{A.17}$$

となっている．ここで λ, Ψ の事を固有値，固有ベクトルと呼んでいる．

A.5.1 固有値問題

オペレータ $\hat{A}$ を２行２列の行列，状態 Ψ を２列のベクトルとするとこの式は

$$\hat{A}\Psi = \lambda\Psi \qquad \Longrightarrow \qquad \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \tag{A.18}$$

と書ける．固有値 λ と固有ベクトル Ψ の求め方としては行列式がゼロ

$$\begin{vmatrix} a_{11} - \lambda & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} - \lambda \end{vmatrix} = 0 \tag{A.19}$$

の方程式をまず解く．これより固有値 λ が求まる．

$$\lambda = \frac{1}{2}\left[a_{11} + a_{22} \pm \sqrt{(a_{11} + a_{22})^2 - 4(a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21})}\right] \tag{A.20}$$

A.5.2 同時固有関数

オペレータ $\hat{A}$, $\hat{B}$ が交換するとき，すなわち

$$\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A} \tag{A.21}$$

のとき，オペレータ $\hat{A}$ と $\hat{B}$ は同時固有関数を持っている．この証明を簡潔にしておこう．まずオペレータ $\hat{A}$ の固有値を a，固有関数を Ψ とすると

$$\hat{A}\Psi = a\Psi \tag{A.22}$$

が固有値方程式である．この時，

$$\hat{A}(\hat{B}\Psi) = \hat{B}\hat{A}\Psi = a(\hat{B}\Psi) \tag{A.23}$$

が示される．従って，$(\hat{B}\Psi)$ も $\hat{A}$ の固有関数である．よって

$$\hat{B}\Psi = b\Psi, \qquad (b \text{ は定数}) \tag{A.24}$$

であり，これは Ψ が $\hat{A}$ と $\hat{B}$ の同時固有関数であることを示している．

A.6　行列式

A.6.1　行列式の定義

$$\det(A) \equiv \sum_P \epsilon_{(m_1 \cdots m_n)} A_{1m_1} \cdots A_{nm_n} \tag{A.25}$$

where $\epsilon_{(m_1 \cdots m_n)}$ is $+1$ for even permutation and
-1 for odd permutation.

● 公式

$$\det(AB) = \det(A)\det(B) \tag{A.26}$$

この証明は

$$\det(A) = \exp(\mathrm{Tr}\ln A) \tag{A.27}$$

を使うとすぐできる.

A.6.2　トレースの定義　: Tr

$$\mathrm{Tr}A \equiv \sum_{i=1}^{n} A_{ii} \tag{A.28}$$

- **公式**　:　$\mathrm{Tr}(AB) = \mathrm{Tr}(BA)$

A.6.3 $\det(A) = \exp(\mathrm{Tr} \ln A)$ の証明

行列式の定義式から行列 A の行列式は Δ_{ij} を小行列式として

$$\det\{A\} = \sum_{i=1}^{N} A_{ij}\Delta_{ij} \tag{A.29}$$

となっている．行列 A は x の関数であるとして式 (A.29) を x で微分すると

$$\frac{d\det\{A\}}{dx} = \sum_{i,j=1}^{N} \frac{dA_{ij}}{dx}\,\Delta_{ij} \tag{A.30}$$

となる．逆行列 A^{-1} は

$$(A^{-1})_{ij} \quad = \frac{\Delta_{ji}}{\det\{A\}} \tag{A.31}$$

と書かれているので，式 (A.30) は

$$\frac{d\det\{A\}}{dx} = \sum_{i,j=1}^{N} \frac{dA_{ij}}{dx}\,(A^{-1})_{ji}\det\{A\} = \mathrm{Tr}\left(A^{-1}\frac{dA}{dx}\right)\det\{A\} \tag{A.32}$$

となる．ここで

$$A = e^{xB} \tag{A.33}$$

としよう．但し，B は定数行列である．この時，

$$\frac{dA}{dx} = Be^{xB}, \quad A^{-1} = e^{-xB} \tag{A.34}$$

である．よって式 (A.32) は

$$\frac{d\det\{e^{xB}\}}{dx} = (\mathrm{Tr}B)\det\{e^{xB}\} \tag{A.35}$$

と求まる．この微分方程式は直ちに解けて

$$\ln\det\{e^{xB}\} = (\mathrm{Tr}B)x + C \tag{A.36}$$

となる．$x = 0$ から $C = 0$ が求まる．これより $x = 1$ と置くと式 (A.36) は

$$\det\{A\} = e^{\mathrm{Tr}\ln A} \tag{A.37}$$

となり，証明された．

A.7　複素数と複素積分

A.7.1　複素数 z の定義

- $z = x + iy = r(\cos\theta + i\sin\theta) = re^{i\theta}$
- $z^* = x - iy = re^{-i\theta}$

- **Euler の公式**

$$e^{i\theta} = \cos\theta + i\sin\theta \tag{A.38}$$

$$\begin{cases} \cos\theta = \dfrac{1}{2}(e^{i\theta} + e^{-i\theta}) \\ \sin\theta = \dfrac{1}{2i}(e^{i\theta} - e^{-i\theta}) \end{cases} \tag{A.39}$$

付 録B　量子力学演習問題 と その解答(手書き)

量 子 力 学 演 習

日本大学理工学部物理学科

(２０１０年)

演習問題の解き方

この問題集には、量子力学を理解する上で非常に基本的な問題を選んである．しかしながら、この基本的な問題を自ら解いてゆくことは相当難しく、いくつかの教科書を参考にして行かないと解けないものである．

しかしほとんどの物理学者も実はこの問題を大学生時代に解こうとした時、難しくて自分では解けなかったはずである．何回か繰り返し解くうちに量子力学の基本が理解されてきたと言うのが事実であると思う．

この問題集が 1 回目で解けるなどと思わないで、繰り返し解いて欲しいものである．問題番号の右上に $*$ がついているものは、計算がかなり大変か、または考え方がかなり難しい問題である事を意味している．

実線で囲んだ式は、かなり重要であり、出来たら覚えてしまった方が良い．

なお、オペレータに対して、No. 4 までは、$\hat{A}$ のような「ハット」を付けてあるが、それ以降では省略している．

問題を解く上での注意

束縛状態の問題を解く時、必ずポテンシャルの図を書き、束縛されたらどの辺に来るのか大雑把な位置にエネルギー E を描き入れる事．

エネルギーの基準点はポテンシャル $U(x)$ によって決まる．ポテンシャルが閉じ込めの場合（例：調和振動子、無限の壁の箱型)、すべての状態が束縛状態になる．通常のポテンシャルの場合、$|x| \to \infty$ で $U(\pm\infty) = 0$ を考えており、この時はエネルギー E が負の場合に、束縛状態になる．

量子力学演習　No. 1

1. 量子力学の方程式は基本的に線形代数で表されている．このため、オペレータ（演算子）という概念に慣れることが量子力学を理解するために必要である．オペレータとしては微分と行列が良く使われる．

   2 行 2 列の Pauli 行列 σ_x , σ_y , σ_z を次式で定義する.

$$\boxed{\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \qquad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \qquad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}}$$

   (a) ${\sigma_x}^2$, ${\sigma_y}^2$, ${\sigma_z}^2$ はいくらか？

   (b) 交換関係 $[A, B] \equiv AB - BA$ を定義する時、次の交換関係
   $[\sigma_x,\, \sigma_y]=2i\sigma_z$,　$[\sigma_y,\, \sigma_z]=2i\sigma_x$,　$[\sigma_z,\, \sigma_x]=2i\sigma_y$ を示せ.

   (c) 反交換関係 $\{A, B\} \equiv AB + BA$ を定義する時、次の反交換関係
   $\{\sigma_x,\, \sigma_y\}$, $\{\sigma_y,\, \sigma_z\}$, $\{\sigma_z,\, \sigma_x\}$ はいくらか？

   (d) 2 つの状態ベクトル u, v を次式で定義する.

$$u = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad v = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

   $\sigma_x u$, $\sigma_x v$, $\sigma_y u$, $\sigma_y v$, $\sigma_z u$, $\sigma_z v$ を u, v で表わせ.

   (e) 一般にオペレーターを A , 状態ベクトルを φ とするとき

   $\boxed{A\varphi = a\varphi}$　　　が成り立つ．

   このとき、φ を A の固有状態 (固有関数)、a をその固有値であるという．但し a は定数．(d) の内からこれをみたしている例をあげよ．その固有値はいくらか？

2. 微分オペレーター $\frac{\partial}{\partial x}$ を状態関数 $\Psi(x)$ にオペレートするとは $\Psi(x)$ を x で微分することである．また、$\frac{\partial}{\partial x}$ を状態関数 $(\Psi_1(x)\Psi_2(x))$ にオペレートすると次式となる.

$$\boxed{\frac{\partial}{\partial x}(\Psi_1(x)\Psi_2(x)) = \left(\frac{\partial}{\partial x}\Psi_1(x)\right)\Psi_2(x) + \Psi_1(x)\left(\frac{\partial}{\partial x}\Psi_2(x)\right)}$$

   (a) $\left[\frac{\partial}{\partial x}, x\right]\Psi(x) = \Psi(x)$ を示せ.

   (b) $\left[\frac{\partial^2}{\partial x^2}, x\right]\Psi(x)$ を計算せよ.

   (c) $\left[\frac{\partial}{\partial x}, e^x\right]\Psi(x)$ を計算せよ.

(d) 質量 m の粒子の 1 次元系でのハミルトニアンが $H = \dfrac{p^2}{2m} + U(x)$ で与えられる場合、量子力学では運動量 p を $\hat{p} = -i\hbar\dfrac{\partial}{\partial x}$ と置き換える (運動量演算子という) ので、H は、$\hat{H} = -\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x)$ となる．但し、$\hbar$ は Planck 定数．この時、次の交換関係を計算せよ．

(i) $[\hat{H}, x]\Psi(x)$,　　(ii) $\left[\hat{H}, \hat{p}\right]\Psi(x)$

(iii) $[\hat{H}, x^2]\Psi(x)$,　　(iv) $\left[\hat{H}, \hat{p}^2\right]\Psi(x)$

3. オペレータ A と B の交換関係を $[A, B] = \hbar$ とする時、

(a) $[A, BC] = [A, B]C + B[A, C]$ を示せ．

(b) $\left[A, B^2\right]$ を計算せよ．

(c) $[A, B^n]$ を計算せよ．(但し、 n は正の整数)

4. ２つの状態ベクトル（波動関数）$\Psi_1(x)$, $\Psi_2(x)$ の内積を次式で定義する．

$$\boxed{< \Psi_1(x)|\Psi_2(x) > \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_1^*(x)\Psi_2(x)dx}$$

このとき、オペレータ $\hat{A}$ が

$$\boxed{< \Psi_1(x)|\hat{A}\Psi_2(x) > = < \hat{A}\Psi_1(x)|\Psi_2(x) >}$$ の時、$\hat{A}$ はエルミート

であるという．ここで、$*$ は複素共役を意味している．

(a) x, $\frac{\partial}{\partial x}$, $\frac{\partial^2}{\partial x^2}$ がエルミートであるかどうか調べよ．但し、$\Psi_1(\pm\infty) = \Psi_2(\pm\infty) = 0$ であると仮定する．

(b) 運動量オペレータ $\hat{p}$ を $\hat{p} = \alpha\frac{\partial}{\partial x}$ と書く．但し、α は定数．$\hat{p}$ がエルミートであるための α の条件を求めよ．さらに、$\hat{p}$ が $[\hat{p}, x] = -i\hbar$ をみたす時、α を決定せよ．

(c) 質量 m の粒子がポテンシャル $V(x)$ （但し、$V(x)$ は実数）の中で運動する時、量子力学のハミルトニアンは $\hat{H} = -\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)$ で与えられる．この時、$\hat{H}$ がエルミートである事を示せ．

(d) この $\hat{H}$ を波動関数 $\Psi(x)$ にオペレートした時の固有値を E として ($\hat{H}\Psi(x) = E\Psi(x)$)、微分方程式を書き下せ．また、この微分方程式を解くためには、$\Psi(x)$ に何個の条件をつければ良いと思うか？

(e) エルミートオペレータの固有値は実数である事を示せ．

5. N 行 N 列の正方行列 $A=\{a_{ij}\}$ がエルミートであるとは

$$\boxed{A=A^\dagger \qquad or \qquad a_{ij}=a_{ji}^*}$$

を充たす事である．この行列 A の固有値を λ とすると

$$\boxed{A\boldsymbol{u}=\lambda\boldsymbol{u}} \qquad \text{が成り立つ．}$$

ここで、$\boldsymbol{u}$ は固有ベクトルでありその成分は $\boldsymbol{u}=(u_1,u_2,\cdots,u_N)$．
また、２つのベクトル $\underline{\boldsymbol{u},\ \boldsymbol{v}}$ の内積 (複素内積) を

$$\boxed{(\boldsymbol{u},\boldsymbol{v})=\sum_{i=1}^{N}u_i^*v_i} \qquad \text{で定義する．}$$

(a) 行列 A がエルミートであるとは

$$(\boldsymbol{u},A\boldsymbol{v})=(A\boldsymbol{u},\boldsymbol{v})$$

を意味している．この式を成分表示する事により証明せよ．

(b) エルミート行列の固有値 λ は実数である事を示せ．

6*. オペレータ A と B の交換関係を $[A,B]=\hbar$ とする時、次式を示したい．

$$e^Ae^B=e^{A+B+\frac{\hbar}{2}} \tag{1}$$

(a) $f(t)=e^{At}e^{Bt}e^{-(A+B)t}$ とおいて $f(t)$ に対して次の微分方程式を求めよ．

$$\frac{df(t)}{dt}=e^{At}\left(Ae^{Bt}-e^{Bt}A\right)e^{-(A+B)t}$$

(b) 交換関係 $\left(Ae^{Bt}-e^{Bt}A\right)$ を計算する際 $e^{Bt}=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}B^nt^n$ を用いて、次式を示せ．

$$[A,e^{Bt}]=\hbar te^{Bt}$$

(c) 以上より、$f(t)$ に対する微分方程式は

$$\frac{df(t)}{dt}=\hbar tf(t)$$

となる．この微分方程式を $f(0)=1$ の初期条件で解く事により、式 (1) を示せ．

量子力学演習　No. 2

1. 1 次元ポテンシャル $U(x)$ の中を運動する質量 m の粒子の Schrödinger 方程式はハミルトニアンを

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x)$$

とすると

$$i\hbar\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t} = \hat{H}\Psi(x,t)$$

と書ける．すなわち

$$\boxed{i\hbar\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi(x,t)}{\partial x^2} + U(x)\Psi(x,t)}$$

である．但し、 $U(x)$ は実関数.

(a) $\Psi^*(x,t)$ に対する方程式を書き下せ．但し、 $*$ は複素共役.

(b) オペレータ $\hat{A}$ の期待値を次式で定義する.

$$\boxed{<\hat{A}>\equiv<\Psi|\hat{A}\Psi>\equiv<\Psi|\hat{A}|\Psi>\equiv\int_{-\infty}^{\infty}\Psi^*(x,t)\hat{A}\Psi(x,t)dx}$$

運動量オペレータ $\hat{p}\equiv -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$ 及びエネルギーオペレータ $\hat{E}\equiv i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$ とする時、

$$<\hat{E}>=<\frac{\hat{p}^2}{2m}>+<U(x)>, \quad \frac{d}{dt}<x>=\frac{1}{m}<\hat{p}>, \quad \frac{d}{dt}<\hat{p}>=-<\frac{\partial U}{\partial x}>$$

が成立する事を示せ．但し、$\Psi(\pm\infty,t)=0$. （Ehrenfest の定理という）

2. ある条件で解いた波動関数 $\Psi(x)$ が $\Psi(x)=Ne^{-\frac{x^2}{2b^2}}$ となったとする．b は正の定数.

(a) 単位オペレータの期待値

$$<1>\equiv\int_{-\infty}^{\infty}\Psi^*(x)\Psi(x)dx$$

が $<1>=1$ となるための N の値を求めよ．（この時、$\Psi(x)$ は規格化されているという．また、$\rho(x)\equiv\Psi^*(x)\Psi(x)$ を確率密度という）

(b) $<x>$, $<x^2>$, $<\hat{p}>$, $<\hat{p}^2>$ を求めよ．但し、$\hat{p}=-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$.

(c) $\Delta x\equiv\sqrt{<x^2>-<x>^2}$, $\Delta p\equiv\sqrt{<\hat{p}^2>-<\hat{p}>^2}$ と定義する時、$\Delta x\Delta p$ を求めよ．これを座標 x と運動量 p の間の不確定性関係という.

(d) $|\Psi(x)|^2$ のグラフを描け．このグラフより粒子の存在確率が主としてどこにあるかを議論せよ.

3. **1. の** Schrödinger **方程式は変数分離型の微分方程式である．**

$$i\hbar\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi(x,t)}{\partial x^2} + U(x)\Psi(x,t)$$

(a) $\Psi(x,t) = T(t)u(x)$ **として次式を導け．**

$$\frac{i\hbar}{T(t)}\frac{dT(t)}{dt} = \frac{1}{u(x)}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2u(x)}{dx^2} + U(x)u(x)\right)$$

(b) **この時、上式の両辺は定数だから、これを** E **とする．この時、次式を導け．**

$$\Psi(x,t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Et}u(x)$$

$$\boxed{\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + U(x)\right)u(x) = Eu(x)}$$

これは、時間に依存しない Schrödinger **方程式となる．ここで、**E **はエネルギー固有値である．**

4. 1 **次元空間でポテンシャルが** x **の偶関数** $U(x) = U(-x)$ **ならば、**Schrödinger **方程式の束縛状態の固有関数は必ず、偶関数または奇関数のどちらかとなることを示したい．**

(a) Schrödinger **方程式**

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + U(x)\right)u(x) = Eu(x)$$

の x **の符号を反転させた方程式と元の方程式とを比較することにより、**$u(x) = cu(-x)$ **を示せ．但し** c **は定数である．**

(b) $u(x) = cu(-x)$ **の式にて** x **の符号を反転させることにより、**$c = \pm 1$ **を示せ．**

(c) (b) **の結果から、波動関数** $u(x)$ **が偶関数または奇関数であることを説明せよ．**

5. **剛体の箱**

$$U(x) = \begin{cases} \infty & : \quad |x| > a \\ 0 & : \quad |x| < a \end{cases}$$

に閉じ込められた質量 m **の粒子の定常状態を考える．**Schrödinger **方程式は**

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + U(x)\right)u(x) = Eu(x)$$

(a) **波動関数** $u(x)$ **に対する境界条件は** $u(\pm a) = 0$ **である．この物理的意味は何か？**

(b) **波動関数の規格化条件** $\int_{-a}^{a}|u(x)|^2dx = 1$ **の物理的意味を述べよ．**

(c) Schrödinger **方程式を解き、エネルギー固有値及び波動関数を求めよ．**

(d) **基底状態に対して** $< x >$, $< x^2 >$, $< p >$, $< p^2 >$ **を求め、不確定性関係を調べよ．**

(e) (c) **で求めた波動関数に対して、異なる固有値に属する波動関数は互いに直交することを示せ．但し、波動関数が互いに直交するとは一般的に**

$$\boxed{\int_{-\infty}^{\infty}u_n^*(x)u_m(x)dx = \delta_{n,m}}$$

ここで、 $u_n(x)$ **の** n **とは、エネルギー固有値** E_n **を指定する量子数である．**

(f) **ポテンシャルは偶関数であるため、問４での議論が成り立つ．求めた** $u(x)$ **が実際に、偶関数または奇関数になっている事を確かめよ．**

6.　箱型ポテンシャル

$$U(x) = \begin{cases} 0 & : \quad |x| > a \\ -U_0 & : \quad |x| < a \end{cases}$$

に束縛された質量 m **の粒子の束縛状態のエネルギー固有値及び波動関数を求めたい**. Schrödinger **方程式は**

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + U(x)\right)u(x) = Eu(x)$$

であり、次のように場合分けして解く. **但し、** E **は負であることに注意せよ**.

(a) $x < -a$ **の場合の微分方程式を解き、一般解を求めよ**. **ここで** $u(-\infty) = 0$ **の条件を使う事**.

(b) $x > a$ **の場合の微分方程式を解き、一般解を求めよ**. **ここで** $u(\infty) = 0$ **の条件を使う事**.

(c) $-a < x < a$ **の場合の微分方程式を解き、一般解を求めよ**. **ここで、** $x = \pm a$ **において、波動関数** $u(x)$ **とその微分係数** $u'(x)$ **が連続であるという条件より、エネルギー固有値を与える式は次の２式で与えられることを示せ**.

$$\text{(i)} \quad \alpha = \beta \tan \beta a, \qquad\qquad \text{(ii)} \quad \alpha = -\beta \cot \beta a$$

ここで α, β **は** $\alpha = \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}}, \quad \beta = \sqrt{\frac{2m(U_0+E)}{\hbar^2}}$ **である.**

(d) **ポテンシャルが偶関数であるため、パリティの観点から波動関数は偶関数または奇関数となるはずである．この事実を利用して** (c) **を解き直せ．**

(e) (i), (ii) **の方程式を具体的に解きたい**. **ここで、** $p = \beta a,\ q = \alpha a$ **とおく**.

(1)

$$p^2 + q^2 = \frac{2mU_0a^2}{\hbar^2}$$

を示せ.

(2) $\frac{2mU_0a^2}{\hbar^2} = 1$ **の時、**(i) **の** $q = p\tan p$, (ii) **の** $q = -p\cot p$ **と** (1) **の式とをそれぞれに連立させ、またグラフを描いて** p, q **の値を求めよ．但し、大雑把でよい**.

(3) $U_0 = 60$ MeV, $mc^2 = 940$ MeV, $a = 3$ fm **とする時、固有値** E **をすべて求めよ**. **ここで、** fm $= 10^{-13}$ cm. **しかし、**$\hbar c = 197$ MeV・fm **を使うと便利である**.

量子力学演習　No. 3

1. No. 1 で導入された 2 行 2 列の Pauli 行列 σ_x , σ_y , σ_z に対して、$\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ を定義する．この時、$\boldsymbol{\sigma}^2 = \sigma_x^2 + \sigma_y^2 + \sigma_z^2$ である．

   (a) この時、$\boldsymbol{\sigma}^2$ と σ_x , σ_y , σ_z は交換する事を示せ．

   (b) 状態ベクトル

$$u = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad v = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

   は、$\boldsymbol{\sigma}^2$ と σ_z の同時固有関数である事を示せ．

   (c) $\boldsymbol{\sigma}^2$ と σ_x の同時固有関数を求めよ．

2. あるエルミートオペレータ A の固有関数を $\phi_1,\ \phi_2,\ \cdots\ \phi_n$ その固有値を $a_1,\ a_2,\ \cdots\ a_n$ とする．すなわち、

$$\boxed{A\phi_n = a_n\phi_n}$$

   (a) この時、異なる固有値に属する固有関数は直交する事を示せ．すなわち、

$$< \phi_n|\phi_m >= \delta_{n,m}$$

   但し、固有関数は規格化されているものとする．

   (b) 波動関数 $\psi(x)$ をオペレータ A の直交規格固有関数、$\phi_1,\ \phi_2,\ \cdots\ \phi_n$ で展開されたとする．すなわち、

$$\psi(x) = \sum_{n=1}^{N} c_n\phi_n(x)$$

   この時、

$$\sum_{n=1}^{N} |c_n|^2 = 1$$

   を示せ．

   (c) ２つのエルミートオペレータ $A,\ B$ が可換な時、すなわち、$[A, B] = 0$ の時, この２つのオペレータ $A,\ B$ の同時固有関数 φ が存在することを示せ．

$$A\varphi = a\varphi, \qquad B\varphi = b\varphi$$

   但し、縮退のない場合のみで良い．

   (d) 2 つの完全規格直交系 $\{\ u_1, u_2, \cdots u_N\ \}$ と $\{\ v_1, v_2, \cdots v_N\ \}$ に対して、$u_n = \sum_{n'=1}^{N} U_{n,n'}v_{n'}$ で定義された行列 U はユニタリー $UU^\dagger = 1$ である事を示せ．

3.　パリティ・オペレータ $\hat{P}$ を

$$\hat{P}\psi(x) = \psi(-x)$$

で定義する．この時、ハミルトニアン $\hat{H}(x)$ は

$$\boxed{\hat{P}\hat{H}(x)\hat{P}^{-1} = \hat{H}(-x)}$$ **と変換される．**

(a) **パリティ・オペレータ $\hat{P}$ の固有値は ± 1 である事を示せ．**

(b) **固有値が ± 1 であることから、パリティ・オペレータの固有関数はどのような性質を持つか？**

(c) **ポテンシャルが偶関数 $U(x) = U(-x)$ のとき、ハミルトニアン $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + U(x)$ とパリティ・オペレータ $\hat{P}$ は交換すること $[\hat{P}, \hat{H}] = 0$ を示せ．**

(d) **$[\hat{P}, \hat{H}] = 0$ より，$\hat{P}$ と $\hat{H}$ の同時固有関数が存在する．このことから、波動関数が偶または奇関数となることを説明せよ．**

4.　ハミルトニアン $H = \dfrac{\hat{p}^2}{2m} + \alpha|x|^n$ で記述されている系の粒子の１次元運動を考える．ここで、α は正の実数であり、n は正の整数である．Schrödinger 方程式を解けばエネルギー固有値が求まるのであるが、一般には簡単ではない．ここでは、最低状態（基底状態）のエネルギー固有値を近似的に求めたい．

(a) **基底状態はパリティオペレータ $\hat{P}$ の $+1$ の固有関数になっている事が知られている．この時、対称性から $< x >= 0$,　 $< \hat{p} >= 0$ を示せ．**

(b) **$n = 2$ の場合を考える．不確定性関係式 $\Delta p \Delta x \sim \dfrac{\hbar}{2}$ を用いて基底状態のエネルギー $E_0 =< H >$ を近似的に求めよ．今の場合、厳密に解いた値は $E_0 = \hbar\sqrt{\dfrac{\alpha}{2m}}$ である．**

5.　オペレータ $\hat{F}$ が時間に陽 (Explicit) にはよらないとする．i.e. $\frac{\partial \hat{F}}{\partial t} = 0$.

(a) **$\hat{F}$ の行列要素を** $\boxed{F_{nm} \equiv < \Psi_n|\hat{F}|\Psi_m > \equiv \int \Psi_n^*(\boldsymbol{r}, t)\hat{F}\Psi_m(\boldsymbol{r}, t)d^3r}$ **とする時、**

$$\frac{dF_{nm}}{dt} = \frac{i}{\hbar}(E_n - E_m)F_{nm}$$

を示せ．但し、質量 M の粒子の Schrödinger 方程式は

$$i\hbar\frac{\partial \Psi_n(\boldsymbol{r}, t)}{\partial t} = \hat{H}\Psi_n(\boldsymbol{r}, t), \qquad \hat{H} = \frac{\hat{\boldsymbol{p}}^2}{2M} + U(\boldsymbol{r})$$

である．ここで、$\boxed{\Psi_n(\boldsymbol{r}, t) = e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}\Psi_n(\boldsymbol{r})}$ を用いて計算してよい．

(b) この式は以下の様に書けることを示せ.

$$\frac{dF_{nm}}{dt} = \frac{i}{\hbar}(\hat{H}\hat{F} - \hat{F}\hat{H})_{nm}$$

(c) 今、オペレータ F として $\hat{F} = \boldsymbol{r}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}$ をとり、交換関係 $[\hat{H}, \hat{F}]$ を計算せよ.

(d) (a),(b) より、 $< \Psi_n|[\hat{H}, \hat{F}]|\Psi_n >= 0$ (対角要素) である. このことより

$$\boxed{2 < \Psi_n|\frac{\hat{\boldsymbol{p}}^2}{2M}|\Psi_n >=< \Psi_n|\boldsymbol{r}\cdot\nabla U|\Psi_n >}$$ を示せ.

これは、量子力学における Virial 定理である.

6*. $\delta(x)$ 関数型ポテンシャル ($U(x) = -U_0\delta(x)$) に束縛された質量 m の粒子の束縛状態のエネルギー固有値及び波動関数を求めたい. Schrödinger 方程式は

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} - U_0\delta(x)\right)u(x) = Eu(x) \tag{2}$$

であり、次のように場合分けして解く. 但し、 E は負であることに注意せよ.
ここで、$\delta(x)$ 関数は

$$\delta(x) = \begin{cases} 0 & x \neq 0 \\ \infty & x = 0 \end{cases}$$

で与えられる. また、

$$\int_{-\epsilon}^{\epsilon}\delta(x)dx = 1, \qquad \int_{-\epsilon}^{\epsilon}\delta(x)f(x)dx = f(0)$$

も満たしている.

(a) $x < 0$ の場合の式 (2) を解き、一般解を求めよ. ここで $u(-\infty) = 0$ の条件を使う事.

(b) $x > 0$ の場合の式 (2) を解き、一般解を求めよ. ここで $u(\infty) = 0$ の条件を使う事.

(c) 波動関数 $u(x)$ は $x = 0$ で連続である. $x < 0$, $x > 0$ それぞれの領域における波動関数を $x = 0$ で接続せよ.

(d) 式 (2) を $-\epsilon < x < \epsilon$ の範囲で積分し、最後に $\epsilon \to 0$ とすることでエネルギー固有値を求めよ.

量子力学演習　No. 4

1.　1次元調和振動子ポテンシャル ($U(x) = \frac{1}{2}m\omega^2x^2$) に束縛された質量 m の粒子の束縛状態のエネルギー固有値及び波動関数を求めたい．Schrödinger 方程式は

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2\right)u(x) = Eu(x) \tag{1}$$

である．この場合、 E は常に正であることに注意せよ．

(a) $\lambda = \dfrac{2E}{\hbar\omega}$, $\alpha = \sqrt{\dfrac{m\omega}{\hbar}}$, $\xi = \alpha x$ とおくと
式 (1) は

$$\left(\frac{d^2}{d\xi^2} + (\lambda - \xi^2)\right)u(\xi) = 0$$

となる事を示せ．

(b) ξ が十分大きい領域では $u(\xi) \sim e^{-\frac{1}{2}\xi^2}$ となる事を示せ．

(c $u(\xi) = f(\xi)e^{-\frac{1}{2}\xi^2}$ とおいて $f(\xi)$ に対する方程式

$$\frac{d^2f}{d\xi^2} - 2\xi\frac{df}{d\xi} + (\lambda - 1)f = 0 \tag{2}$$

を求めよ．

(d) $f(\xi)$ を次のように展開する．

$$f(\xi) = \xi^s(a_0 + a_1\xi^2 + \cdots + a_n\xi^{2n} + \cdots)$$

但し、 $a_0 \neq 0$．この時、

$$s(s-1) = 0$$

$$(2n+2+s)(2n+1+s)a_{n+1} = (4n+2s+1-\lambda)a_n \tag{3}$$

が成立する事を示せ．

(e) 式 (3) で n が十分大きい時、 $\dfrac{a_{n+1}}{a_n} \approx \dfrac{1}{n}$ となる．これより、$a_n \approx \dfrac{1}{n!}$ と予想される．この時、ξ が十分大きいところでは、$f(\xi) \approx e^{\xi^2}$ となる．これが境界条件と矛盾している事を示せ．

(f) 上の矛盾を避けるためには、どこかで $a_n = 0$ となるべきである．すなわち、

$$4n + 2s + 1 - \lambda = 0$$

これより、エネルギー固有値が $E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})$,　$n = 0, 1, 2, \cdots$ となる事を示せ．

2. **1次元調和振動子の問題の続きを考えよう.**

(a) **問1の式 (2) において 固有値 E_n に対する解 $f(\xi)$ を n 次の Hermite 多項式と呼び、$H_n(\xi)$ で表す. $H_n(\xi)$ は**

$$\frac{d^2 H_n}{d\xi^2} - 2\xi \frac{dH_n}{d\xi} + 2nH_n = 0 \tag{4}$$

を満たす事を示せ.

(b) **母関数 $S(\xi, x) \equiv e^{-x^2+2\xi x}$ を使うと、Hermite 多項式 $H_n(\xi)$ は**

$$e^{-x^2+2\xi x} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} H_n(\xi) x^n \tag{5}$$

と書ける. この時、

$$H_n(\xi) = (-)^n e^{\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2} \tag{6}$$

と表されることを示せ.

(c) **式 (5), (6) を使って**

$$\frac{dH_n}{d\xi} = 2nH_{n-1}$$

$$H_{n+1} = 2\xi H_n - 2nH_{n-1}$$

を示せ. これより、$H_n(\xi)$ が確かに式 (4) を満たしていることを示せ.

3*. **1次元調和振動子の問題の続きを考えよう.**

(a) **Hermite 多項式 $H_n(\xi)$ のうち、最初の 4 項 H_0, H_1, H_2, H_3 を具体的に求めよ.**

(b) **調和振動子の波動関数 $u_n(x)$ は**

$$u_n(x) = N_n e^{-\frac{1}{2}\xi^2} H_n(\xi), \qquad \xi = \alpha x = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x$$

N_n は規格化定数. ここで、規格化条件 $\boxed{\int_{-\infty}^{\infty} |u_n(x)|^2 dx = 1}$ **より、$n = 0, 1, 2, 3$ の場合の N_0, N_1, N_2, N_3 を決めよ.**

(c) **波動関数 $u_n(x)$ は互いに直交している**

$$\int_{-\infty}^{\infty} u_n^*(x) u_m(x) dx = \delta_{n,m}$$

ことを示したい. 式 (5) より、

$$e^{-x^2+2\xi x - y^2 + 2\xi y - \xi^2} = \sum_{n,m=0}^{\infty} \frac{1}{n!m!} x^n y^m H_n(\xi) H_m(\xi) e^{-\xi^2} \tag{7}$$

である. この両辺を ξ で積分すると左辺は

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2+2\xi x - y^2 + 2\xi y - \xi^2} d\xi = \sqrt{\pi} e^{2xy}$$

である事を示せ．また、右辺は

$$\sum_{n,m=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\frac{1}{m!}x^n y^m\int_{-\infty}^{\infty}H_n(\xi)H_m(\xi)e^{-\xi^2}d\xi$$

となる．これより、

$$\int_{-\infty}^{\infty}H_n(\xi)H_m(\xi)e^{-\xi^2}d\xi=\sqrt{\pi}2^n n!\delta_{nm}$$

である事を示せ．また、この式より波動関数 $u_n(x)$ の規格化定数 N_n を決定せよ．

4. 1次元調和振動子の問題でエネルギーが飛び飛びの値になった．この原因は主として何処にあると思うか、理由を考えよ．

5. 1次元調和振動子の問題を別の手法で解きたい．オペレータ a, $a^\dagger$ を次のように導入する．

$$\boxed{a=\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x+\frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\hat{p},\qquad a^\dagger=\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x-\frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\hat{p}}$$

(a) $[a,a^\dagger]=1$ を示せ．

(b) ハミルトニアン $\hat{H}=\frac{\hat{p}^2}{2m}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2$ を a, $a^\dagger$ で書き直すと $\boxed{\hat{H}=\hbar\omega\left(a^\dagger a+\frac{1}{2}\right)}$ となる事を示せ．

(c) $\hat{N}=a^\dagger a$ と定義する時、$[\hat{N},a]$, $[\hat{N},a^\dagger]$ を計算せよ．

(d) $\hat{N}$ の固有関数および固有値を ϕ_n, n とする．i.e. $\hat{N}\phi_n=n\phi_n$．この時、$a\phi_n$, $a^\dagger\phi_n$ も $\hat{N}$ の固有関数になっている事を示し、その固有値を求めよ．

(e) $\hat{N}$ の固有値 n は 0 または正の整数である事を示せ．
ここで、 $n=<\phi_n\hat{N}\phi_n>=<\phi_n a^\dagger a\phi_n>$ に注意せよ．

(f) 以上より、 $\hat{H}$ の固有値は

$$\boxed{E_n=\hbar\omega\left(n+\tfrac{1}{2}\right),\qquad n=0,1,2\cdots}$$

である事を示せ．

(g) この解き方では境界条件が入っていない様に見える．何故固有値が求められたと思うか？

6. 問題 5 で求めたように $a^\dagger$, a は生成、消滅演算子となっている．すなわち、

$$a^\dagger|\phi_n>=\alpha|\phi_{n+1}>,\qquad a|\phi_n>=\beta|\phi_{n-1}>$$

であった．この α, β を決定したい．

(a) $<\phi_n|aa^\dagger|\phi_n>=\alpha^2<\phi_{n+1}|\phi_{n+1}>$ を示し、これより $\alpha=\sqrt{n+1}$ を示せ．

(b) 同様にして、$\beta=\sqrt{n}$ を示せ．これらより、次式が求まったわけである．

$$\boxed{a^\dagger|\phi_n>=\sqrt{n+1}|\phi_{n+1}>,\qquad a|\phi_n>=\sqrt{n}|\phi_{n-1}>}$$

量子力学演習　No. 5

1.　∇ オペレータの極座標表示は

$$\nabla = \mathbf{e}_r \frac{\partial}{\partial r} + \mathbf{e}_\theta \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial \theta} + \mathbf{e}_\varphi \frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial \varphi}$$

である．このことより、

$$\boxed{\nabla^2 = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}}$$

を示せ．ただし、次式を使ってよい．

$$\begin{cases} d\mathbf{e}_r = \mathbf{e}_\theta d\theta + \sin\theta\ \mathbf{e}_\varphi d\varphi \\ d\mathbf{e}_\theta = -\mathbf{e}_r d\theta + \cos\theta\ \mathbf{e}_\varphi d\varphi \\ d\mathbf{e}_\varphi = -\sin\theta\ \mathbf{e}_r d\varphi - \cos\theta\ \mathbf{e}_\theta d\varphi \end{cases}$$

2.　質量 M の粒子の 3 次元運動がハミルトニアン

$$H = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2M} + V(r)$$

で記述されるとする．この時、Schrödinger 方程式は

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\nabla^2\psi(\boldsymbol{r}) + V(r)\psi(\boldsymbol{r}) = E\psi(\boldsymbol{r})$$

である．ここで、$V(r)$ は中心力ポテンシャルである．

(a) Schrödinger 方程式を極座標で書け．

(b) この Schrödinger 方程式は変数分離型になっている．今、$\psi(\boldsymbol{r}) = u(r)Y(\theta,\varphi)$ とおいて、$u(r)$, $Y(\theta,\varphi)$ に対する方程式を求めると、

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\left(\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}r^2\frac{du(r)}{dr} + \frac{\lambda}{r^2}u(r)\right) + V(r)u(r) = Eu(r) \tag{1}$$

$$\left(\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right)Y(\theta,\varphi) = \lambda Y(\theta,\varphi) \tag{2}$$

と求まる事を示せ．但し、 λ は定数．

(c) 式 (2) の方程式は変数分離型になっている．$Y(\theta,\varphi) = f(\theta)g(\varphi)$ とおくと

$$\left(\frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\sin\theta\frac{d}{d\theta} - \frac{\nu}{\sin^2\theta}\right)f(\theta) = \lambda f(\theta) \tag{3}$$

$$\left(\frac{d^2}{d\varphi^2} + \nu\right)g(\varphi) = 0 \tag{4}$$

となる事を示せ．但し、 ν は定数．

3. 問 2 の式 (4) を解きたい.

$$\left(\frac{d^2}{d\varphi^2}+\nu\right)g(\varphi)=0 \tag{4}$$

この時、$g(\varphi)$ は、後で定義する角運動量の $z-$ 成分 $L_z=-i\hbar\dfrac{\partial}{\partial\varphi}$ の固有関数である事を要求し、また、$g(\varphi)$ は周期境界条件 $g(\varphi)=g(\varphi+2\pi)$ を満たすものとする．この時、$g(\varphi)$ を求めよ．また、ν にはどのような制限がつくか？

4*. 問 2 の式 (3) を解きたい.

$$\left(\frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\sin\theta\frac{d}{d\theta}-\frac{\nu}{\sin^2\theta}\right)f(\theta)=\lambda f(\theta) \tag{3}$$

(a) $\zeta=\cos\theta$, $P(\zeta)=f(\theta)$ とおいて式 (3) を書き直すと、

$$\left(\frac{d}{d\zeta}(1-\zeta^2)\frac{d}{d\zeta}-\lambda-\frac{m^2}{1-\zeta^2}\right)P(\zeta)=0 \tag{5}$$

となる事を示せ．但し、 $\nu=m^2$ とおいた.

(b) 簡単のため $m=0$ の場合のみを考える．$P(\zeta)=\sum_{n=0}^{\infty}a_n\zeta^n$ と展開して、 a_n に対する条件を求めよ．また、$P(\zeta)$ が $\zeta=\pm1$ で発散しないという条件から $\lambda=-\ell(\ell+1)$ である事を示せ．ここで、$\ell=0,1,2,\cdots$ である.

5. 角運動量 L を

$$\boldsymbol{L}=\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p},\qquad \boldsymbol{p}=-i\hbar\nabla$$ で定義する.

この時、$\boldsymbol{L}^2=L_x^2+L_y^2+L_z^2$ を極座標で書くと、

$$\boxed{\boldsymbol{L}^2=-\hbar^2\left(\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right)}$$ である.

(a) ハミルトニアン $H=\dfrac{\boldsymbol{p}^2}{2M}+V(r)$ を角運動量 L を使って書き直すと

$$H=-\frac{\hbar^2}{2M}\left(\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)+\frac{\boldsymbol{L}^2}{2Mr^2}+V(r)$$

と書ける．このハミルトニアンの第 2 項は古典力学の何の項に対応しているか？またこの項は引力か斥力か？

(b) ハミルトニアンと L^2 が交換する事を示せ.

(c) この事は、ハミルトニアンと L^2 が同時固有関数を持つ事を示している．このことを波動関数 $\psi(\boldsymbol{r})=u(r)Y(\theta,\varphi)$ を用いて説明せよ.

6. L^2 の固有値を次のステップで求めたい．ここで、

$$\Delta \equiv \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r} - \frac{\boldsymbol{L}^2}{\hbar^2 r^2}$$

に注意する．

(a) $f_\ell(x,y,z)$ として次の式を導入する．

$$f_\ell(x,y,z) = (ax+by+cz)^\ell, \qquad \ell = 0,1,2,\cdots$$

この $f_\ell(x,y,z)$ に Δ をオペレートした時、

$$\Delta f_\ell(x,y,z) = 0$$

であったとする．この時、a, b, c の満たすべき条件は何か？

(b) $f_\ell(x,y,z)$ は x, y, z の同次式で書けている．すなわち、

$$f_\ell(x,y,z) = \sum_{\alpha+\beta+\gamma=\ell} A_\ell^{\alpha\beta\gamma} x^\alpha y^\beta z^\gamma$$

但し、$A_\ell^{\alpha\beta\gamma}$ は定数．これより、

$$f_\ell(x,y,z) = Cr^\ell Y_\ell(\theta,\varphi)$$

と書けることを示せ．但し、C は定数．また、$Y_\ell(\theta,\varphi)$ は θ,φ の任意の関数．

(c) 以上より、

$$\boldsymbol{L}^2 Y_\ell(\theta,\varphi) = \hbar^2\ell(\ell+1)Y_\ell(\theta,\varphi)$$

を証明せよ．

量子力学演習　No. 6

1.　角運動量 $\boldsymbol{L} = \boldsymbol{r} \times \boldsymbol{p}$ を成分表示すれば、デカルト座標と極座標では、

$$\begin{cases} L_x = i\hbar \left(z\dfrac{\partial}{\partial y} - y\dfrac{\partial}{\partial z} \right) \\ L_y = i\hbar \left(x\dfrac{\partial}{\partial z} - z\dfrac{\partial}{\partial x} \right) \\ L_z = i\hbar \left(y\dfrac{\partial}{\partial x} - x\dfrac{\partial}{\partial y} \right) \end{cases}, \qquad \begin{cases} L_x + iL_y = \hbar e^{i\varphi} \left(\dfrac{\partial}{\partial \theta} + i\cot\theta \dfrac{\partial}{\partial \varphi} \right) \\ L_x - iL_y = \hbar e^{-i\varphi} \left(-\dfrac{\partial}{\partial \theta} + i\cot\theta \dfrac{\partial}{\partial \varphi} \right) \\ L_z = -i\hbar \dfrac{\partial}{\partial \varphi} \end{cases}$$

である．角運動量 $\boldsymbol{L}$ に対して次の交換関係を示せ．

(a) $[L_x, x] = 0,\quad [L_x, y] = i\hbar z,\quad [L_x, p_x] = 0,\quad [L_x, p_y] = i\hbar p_z$

(b) $\boxed{[L_x, L_y] = i\hbar L_z,\quad [L_y, L_z] = i\hbar L_x,\quad [L_z, L_x] = i\hbar L_y}$

(c) $[\boldsymbol{L}^2, L_x] = 0,\quad [\boldsymbol{L}^2, L_y] = 0,\quad [\boldsymbol{L}^2, L_z] = 0$

2.　$\boldsymbol{L}^2$ の固有値と固有関数は微分方程式を解くことにより

$$\boxed{\boldsymbol{L}^2 Y_{\ell m}(\theta, \varphi) = \hbar^2 \ell(\ell+1) Y_{\ell m}(\theta, \varphi)}$$

であり、固有関数 $Y_{\ell m}(\theta, \varphi)$ が求められている．この $Y_{\ell m}(\theta, \varphi)$ は球面調和関数と呼ばれる．ここでは、別の手法により、 $Y_{\ell m}(\theta, \varphi)$ を求めたい．但し、

$$Y_{\ell m}(\theta, \varphi) = f_{\ell m}(\theta) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi}$$

の形から出発する．

(a) この時

$$\boxed{L_z Y_{\ell m}(\theta, \varphi) = \hbar m Y_{\ell m}(\theta, \varphi)} \qquad \text{を示せ．}$$

(b) m に上限と下限があることを示せ．この時、 $\boldsymbol{L}^2 - L_z^2 = L_x^2 + L_y^2 \geq 0$ に注意せよ．

(c) $L_\pm \equiv L_x \pm iL_y$ と定義する時、

$$[L_z, L_\pm] = \pm\hbar L_\pm$$

を示せ．

(d) (c) を用いて、

$$L_z L_\pm Y_{\ell m}(\theta, \varphi) = \hbar(m \pm 1) L_\pm Y_{\ell m}(\theta, \varphi)$$

を示せ．これより、$L_\pm Y_{\ell m}(\theta, \varphi)$ も L_z の固有関数である．これより、

$$L_\pm Y_{\ell m}(\theta, \varphi) = k Y_{\ell, m\pm 1}(\theta, \varphi)$$

を示せ．但し、 k は定数．この結果から $L_\pm$ は昇降演算子と呼ばれる．

3. **$\boldsymbol{L}^2$ の固有値と固有関数を求める代数的手法のつづき.**

(a)

$$L_-L_+ = \boldsymbol{L}^2 - L_z^2 - \hbar L_z$$

を示せ. これを $Y_{\ell\ell}(\theta,\varphi)$ **にオペレートする事により、**

$$\boldsymbol{L}^2 Y_{\ell\ell}(\theta,\varphi) = \hbar^2\ell(\ell+1)Y_{\ell\ell}(\theta,\varphi)$$

を示せ.

(b) $L_+Y_{\ell\ell}(\theta,\varphi) = 0$ **を用いて、**

$$\frac{df_{\ell\ell}(\theta)}{d\theta} - \ell\cot\theta f_{\ell\ell}(\theta) = 0$$

を導け. これより、

$$f_{\ell\ell}(\theta) = N_\ell \sin^\ell\theta$$

を示せ. 但し、 N_ℓ **は規格化定数.**

(c*) **規格化条件**

$$\int_0^\pi |f_{\ell\ell}(\theta)|^2 \sin\theta d\theta = 1$$

より N_ℓ **を決めよ.**

4. **$\boldsymbol{L}^2$ は** L_+, L_- **を使って**

$$\boldsymbol{L}^2 = L_+L_- + L_z^2 - \hbar L_z$$

と書ける.

(a) **この時、**$Y_{\ell m}(\theta,\varphi)$ **により上式の期待値をとると**

$$\hbar^2\ell(\ell+1) =< Y_{\ell,m}|L_+|Y_{\ell,m-1} >< Y_{\ell,m-1}|L_-|Y_{\ell,m} > +\hbar^2 m^2 - \hbar^2 m$$

である事を示せ.

(b) L_x, L_y **はエルミートである事から、**

$$< Y_{\ell,m}|L_+|Y_{\ell,m-1} >^* =< Y_{\ell,m-1}|L_-|Y_{\ell,m} >$$

である. これより、

$$< Y_{\ell,m}|L_x + iL_y|Y_{\ell,m-1} >= \hbar\sqrt{(\ell-m+1)(\ell+m)}$$

$$< Y_{\ell,m-1}|L_x - iL_y|Y_{\ell,m} >= \hbar\sqrt{(\ell-m+1)(\ell+m)}$$

と求められる事を示せ.

(c) L_- **は** $Y_{\ell,m}(\theta,\varphi)$ **に作用し、磁気量子数** m **が１つ小さい状態** $Y_{\ell,m-1}(\theta,\varphi)$ **に変化させる演算子であり、**C_- **を** l,m **による定数として**

$$L_-Y_{\ell,m}(\theta,\varphi) = C_-Y_{\ell,m-1}(\theta,\varphi)$$

と書くことができる. (b) **の結果の** 2 **行目の式を用いて、定数** C_- **を求めよ.**

一般の $Y_{\ell m}(\theta,\varphi)$ **は、問３で求めた** $Y_{\ell\ell}(\theta,\varphi)$ **に** L_- **を繰り返しオペレートする事により求まる.**

5*. 空間の回転と角運動量が密接に関連している事を見て行きたい．問題を簡単にするために $z-$ 軸の回転を考える．点 $P(x,y,z)$ を $z-$ 軸の回りに θ だけ回転すると、点 $P'(x',y',z')$ になる．

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\theta & -\sin\theta & 0 \\ \sin\theta & \cos\theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \tag{1}$$

この時、関数 $\Psi(x,y,z)$ は $\Psi'(x,y,z)$ になり、

$$\Psi'(x,y,z) = U_\theta \Psi(x,y,z) = \Psi(x',y',z')$$

と書き、 U_θ を回転オペレータと呼ぶ.

(a) θ が十分小さい時、式 (1) は

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & -\theta & 0 \\ \theta & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \tag{2}$$

であり、これより

$$\Psi(x',y',z') = \Psi(x-y\theta, y+x\theta, z)$$

とおいて、θ が十分小さいとして Taylor 展開して、

$$U_\theta = 1 - \theta\left(y\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial y}\right) + \cdots$$

を求めよ.

(b) 角運動量 L_z は

$$L_z = i\hbar\left(y\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial y}\right)$$

である．この事より、 U_θ を角運動量 L_z を使って

$$U_\theta = 1 + \frac{i\theta}{\hbar}L_z$$

と書けることを示せ.

(c) この式は θ が十分小さい時に成立する． θ が有限の大きさの時は $\frac{\theta}{n}$ を n 回転させる.

$$U_\theta = \left(1 + \frac{i\theta}{n\hbar}L_z\right)^n$$

この n を十分大きくすると

$$U_\theta = e^{\frac{i\theta}{\hbar}L_z}$$

と求まる事を示せ.

(d) この U_θ はユニタリーである事を示せ.

量子力学演習　No. 7

1.　質量 m の粒子の 3 次元 Schrödinger 方程式は

$$\boxed{\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r}+\frac{\boldsymbol{L}^2}{2mr^2}+V(r)\right)\psi(\boldsymbol{r})=E\psi(\boldsymbol{r})}$$

であった．ポテンシャルが中心力の場合、$\psi(\boldsymbol{r})=R(r)Y_{\ell m}(\theta,\varphi)$ とおく事ができ、動径部分の波動関数に対する微分方程式に帰着される．

(a) $R(r)=\dfrac{u(r)}{r}$ とおいて $u(r)$ に対する方程式を求めると

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dr^2}+\frac{\hbar^2\ell(\ell+1)}{2mr^2}+V(r)\right)u(r)=Eu(r) \tag{1}$$

となる事を示せ．

(b) 通常 $\ell=0,1,2,3,\cdots$ を次のように呼んでいる．[$\ell=0$: $s-$ 波]、[$\ell=1$; $p-$ 波]、[$\ell=2$: $d-$ 波]、[$\ell=3$: $f-$ 波]．$f-$ 波より大きな ℓ に対しては アルファベット順である．束縛状態を考える時、 $s-$ 波が最低エネルギーになる．これは何故かを定性的に議論せよ．

(c) 今、 $s-$ 波の状態を考える．ポテンシャルが３次元の箱型の場合、

$$V(r)=\begin{cases}-V_0 & : \ r\le a\\ 0 & : \ r\ge a\end{cases}$$

束縛状態のエネルギーを与える式を求めよ．但し、境界条件は $u(0)=0,\ u(\infty)=0$ である．

2. 質量 m_1 と m_2 の 2 つの粒子がポテンシャル $V(|\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2|)$ で相互作用している系を考える．このハミルトニアンは

$$H = \frac{\boldsymbol{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\boldsymbol{p}_2^2}{2m_2} + V(|\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2|)$$

で与えられる．

(a) この系を重心座標と相対座標で書くと

$$H = \frac{\boldsymbol{P}^2}{2M} + \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m} + V(r)$$

となることを示せ．ただし、$\boldsymbol{R} = (m_1\boldsymbol{r}_1 + m_2\boldsymbol{r}_2)/(m_1+m_2)$, $\boldsymbol{r} = \boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2$ であり、$\boldsymbol{P}$, $\boldsymbol{p}$ はその共役運動量である．また、$M = m_1 + m_2$ は全質量、 $m = \dfrac{m_1 m_2}{m_1+m_2}$ は換算質量である．この時、$\boldsymbol{p_1} = \boldsymbol{p} + \dfrac{m_1}{M}\boldsymbol{P}$, $\boldsymbol{p_2} = -\boldsymbol{p} + \dfrac{m_2}{M}\boldsymbol{P}$．このことより、系は重心座標と相対座標が分離しており、重心運動は自由粒子のものなので今後は考える必要は無い事がわかる．

(b) 水素原子を考えると、換算質量はほとんど電子の質量と考えてよい事を示せ．

(c) 以上より、水素型原子における電子の Schrödinger 方程式は

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\boldsymbol{L}^2}{2mr^2} - \frac{Ze^2}{r}\right)\psi(\boldsymbol{r}) = E\psi(\boldsymbol{r})$$

となる．Z は原子核の電荷である．ここで、$\psi(\boldsymbol{r}) = \dfrac{u(r)}{r}Y_{\ell m}(\theta,\varphi)$ とおいて、動径部分の波動方程式を求めると、

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2\ell(\ell+1)}{2mr^2} - \frac{Ze^2}{r}\right)u(r) = Eu(r) \tag{2}$$

となる事を示せ．

(d) 束縛状態を調べるので $E < 0$ である．また、波動関数に対する境界条件は $u(\infty) = 0$ 及び $u(0) = 0$ である．今、r が十分大きい時、式 (2) は

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2u(r)}{dr^2} = Eu(r)$$

となる．この時、$r \to \infty$ で $u(r) \to 0$ の解を求めよ．

(e) 新しい変数として $\rho = 2\sqrt{\dfrac{2m|E|}{\hbar^2}}\ r$, $\quad \epsilon = \sqrt{\dfrac{me^4}{2\hbar^2|E|}}$ を導入すると (2) は

$$\frac{d^2u(r)}{d\rho^2} + \left\{-\frac{1}{4} - \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2} + \frac{\epsilon Z}{\rho}\right\}u(r) = 0 \tag{3}$$

となることを示せ．

3*. **前の問題の式 (3) を級数展開により解きたい.**

(a) $u(\rho) = e^{-\rho/2}\rho^{\ell+1}L(\rho)$ **とおいて** $L(\rho)$ **に対する微分方程式**

$$\rho L'' + \{(2(\ell+1) - \rho\}L' + (\epsilon Z - \ell - 1)L = 0$$

を示せ.

(b) $L(\rho)$ **を級数展開して** $L(\rho) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \rho^n$ **を式 (3) に代入して** ρ **の各べきの係数をゼロとおいて**

$$(\epsilon Z - \ell - 1 - n)a_n + \{2(n+1)(\ell+1) + n(n+1)\}a_{n+1} = 0 \tag{4}$$

を示せ.

(c) **波動関数の境界条件** $u(\infty) = 0$ **と矛盾のない解を得るためには** ρ **が十分大きい所の振る舞いを見る必要がある. この事は級数展開で** n **の大きいところをみる事に対応している. 十分大きい** n **では** $a_n \approx \dfrac{1}{n!}$ **となる事を示せ.**

(d) **この時、**$L(\rho) \approx e^{\rho}$ **となり、波動関数** $u(\rho)$ **に対する境界条件が満たされない事を示せ.**

(e) **この矛盾を解決するには** a_n **がどこかの** $n = n_r$ **でゼロになる必要がある. よって、式 (4) より**

$$\epsilon Z - \ell - 1 - n_r = 0$$

を導け.

(f) **上式より、**

$$E \equiv E_n = -\frac{mZ^2e^4}{2\hbar^2 n^2}$$

を求めよ. 但し、$n \equiv n_r + \ell + 1$ **とした.**
ここで、n **を主量子数、**ℓ **を方位量子数という. これが、水素原子の束縛エネルギーであり、一度導出した後は覚えておく事が必要である.**

4. **水素原子の束縛エネルギー** E_n **は** n_r **が** $n_r = 0, 1, 2\cdots$ **と動くので次のように状態が作られる.**

$n_r = 0$ $\qquad$ $\boxed{\ell = 0 \longrightarrow n = 1 \qquad 1s-\text{ 状態}}$

$n_r = 0$ $\qquad$ $\boxed{\ell = 1 \longrightarrow n = 2 \qquad 2p-\text{ 状態}}$
$n_r = 1$ $\qquad$ $\ell = 0 \longrightarrow n = 2 \qquad 2s-$ **状態**

$n_r = 0$ $\qquad$ $\ell = 2 \longrightarrow n = 3 \qquad 3d-$ **状態**
$n_r = 1$ $\qquad$ $\ell = 1 \longrightarrow n = 3 \qquad 3p-$ **状態**
$n_r = 2$ $\qquad$ $\ell = 0 \longrightarrow n = 3 \qquad 3s-$ **状態**

さらに、状態は $Y_{\ell m}(\theta, \varphi)$ **の量子数** m **によっても指定されているが、エネルギー** E_n **は量子数** m **によっていない. これらの事を考慮して** n **で指定される状態の縮退度が**

$$\sum_{\ell=0}^{n-1}(2\ell+1) = n^2$$

である事を示せ.

量子力学演習　No. 8

1. 水素型原子における電子の波動関数は $\psi(\boldsymbol{r})_{n\ell m} = R_{n\ell}(r)Y_{\ell m}(\theta,\varphi)$ で与えられ、そのエネルギー固有値は

$$\boxed{E_n = -\frac{mZ^2e^4}{2\hbar^2 n^2}, \qquad (n = 1, 2, \cdots)}$$ と求められた.

(a) 水素原子の基底状態の束縛エネルギーは何 eV であるか？ ここで、$mc^2 = 0.511$ MeV, $\frac{e^2}{\hbar c} = \frac{1}{137}$ である.

(b) $1s-$ 状態の波動関数を書け．電子は主としてどこに存在するか？

(c) $2p-$ 状態の波動関数を書け．3 個の状態をすべて書くこと.

(d) オペレータ A の電子の波動関数による行列要素を

$$A_{n'\ell'm',n\ell m} \equiv < n'\ell'm'|A|n\ell m > \equiv \int \psi^*_{n'\ell'm'}(\boldsymbol{r})A\psi_{n\ell m}(\boldsymbol{r})d^3r$$

で定義する．この時、

$$< 1s|\frac{Ze^2}{r}|1s >, \quad < 2p|\frac{Ze^2}{r}|2p >$$

を計算せよ．また、これらの値をそれぞれ束縛エネルギー E_1，E_2 と比較せよ.

(e*) 電子が $2p-$ 状態にいるとその状態は不安定であるためその下の状態 ($1s-$ 状態) に光を放出しながら遷移する．この時の遷移確率は $| < 2p|r\cos\theta|1s > |^2$ に比例する. この行列要素 $< 2p|r\cos\theta|1s >$ 計算せよ.

2. 質量 m の粒子が 3 次元調和振動子ポテンシャルに束縛されている場合の Schrödinger 方程式は次式で与えられる.

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\boldsymbol{L}^2}{2mr^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 r^2\right)\Psi(\boldsymbol{r}) = E\Psi(\boldsymbol{r})$$

この時、基底状態は $1s-$ 状態であり、その波動関数は

$$\Psi_{1s}(\boldsymbol{r}) = Ne^{-\frac{1}{2}\alpha^2 r^2}$$

で与えられる．ここで、$\alpha = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$.

(a) 規格化定数 N を求めよ．ここで、積分は 3 次元であることに注意せよ.

(b) 運動エネルギー $T = \dfrac{\boldsymbol{p}^2}{2m}$ 及びポテンシャルエネルギー $V = \dfrac{1}{2}m\omega^2 r^2$ の $1s-$ 状態の期待値

$$< 1s|T|1s > = \int \Psi^*_{1s}(\boldsymbol{r})T\Psi_{1s}(\boldsymbol{r})d^3r, \quad < 1s|V|1s > = \int \Psi^*_{1s}(\boldsymbol{r})V\Psi_{1s}(\boldsymbol{r})d^3r$$

を求めよ.

(c) この時、No.3 の問 6 で求めた Virial 定理が成立している事を確かめよ.

3*. **角運動量 J について、その交換関係だけで定義する．すなわち**

$$[J_x, J_y] = i\hbar J_z, \quad [J_y, J_z] = i\hbar J_x, \quad [J_z, J_x] = i\hbar J_y$$

(a) **この時、**$[\boldsymbol{J}^2, J_z] = 0$ **を示せ.**

(b) $\boldsymbol{J}^2$, J_z **は同時固有関数を持つ．**$\boldsymbol{J}^2$, J_z **の固有関数を** $|JM>$ **とすると**

$$\boldsymbol{J}^2|JM>=\hbar^2 J(J+1)|JM>, \quad J_z|JM>=\hbar M|JM>$$

この時、オペレータ J_x．J_y，J_z **の期待値を**
$<J', M'|J_x|J, M>$，$<J', M'|J_y|J, M>$，$<J', M'|J_z|J, M>$
と表す時、J_x，J_y，J_z **の行列要素という．**
これらの行列要素はNo. 6 **の問題** 4 **で求めたように**

$$<J, M\pm 1|J_x \pm iJ_y|J, M>=\hbar\sqrt{J(J+1)-M(M\pm 1)}$$

$$<J, M'|J_z|J, M>=\hbar M\delta_{M',M}$$

であり、それ以外の行列要素はゼロである．$J=\frac{1}{2}$ **の時、** J_x．J_y，J_z **を行列で表せ．**
これは、Pauli **行列とどのような関係にあるか？**

(c) $J=1$ **の時、** J_x，J_y，J_z **を行列で表せ．**

4. **電子の状態を記述するためには、**$u(\boldsymbol{r})$ **以外にスピンの自由度を考慮する必要がある．両方合わせて、**$\psi(\boldsymbol{r}, m_\sigma) = u(\boldsymbol{r})\chi_{m_\sigma}$ **と書く．ここで、**m_σ **は** $\frac{1}{2}$, $-\frac{1}{2}$ **をとる．また、スピンの波動関数** χ_{m_σ} **は**

$$\chi_{\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \chi_{-\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

で与えられる．また、スピンオペレータ s **は** Pauli **行列** $\boldsymbol{\sigma}$ **により** $\boxed{\boldsymbol{s} = \dfrac{\hbar}{2}\boldsymbol{\sigma}}$ **で記述される．**[No.1 **の問** 1 **参照**].

(a) **スピンオペレータ** s **は角運動量** $\boldsymbol{L}$ **と同じ交換関係**

$$\boxed{[s_x, s_y] = i\hbar s_z, \quad [\boldsymbol{s}^2, s_z] = 0}$$

を満たす事を示せ．

(b) $\boldsymbol{s}^2$ **の固有値を求めよ．**

(c) **スピンの波動関数** $\chi_{\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \chi_{-\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ **は** $\boldsymbol{s}^2$, s_z **の固有関数になっている事を示せ．**

(d) **この** $\chi_{\frac{1}{2}}$ **と** $\chi_{-\frac{1}{2}}$ **は** s_x **の固有関数になっていないことを示せ．**

(e) s_x **の固有関数を求めよ．**

5*. 2粒子系のスピンの波動関数を作りたい．但し、1の電子のスピンオペレータを s_1, その固有関数を $\chi^{(1)}_{m_1}$ とし、2の電子のスピンオペレータを s_2, その固有関数を $\chi^{(2)}_{m_2}$ とする．全体の合成スピンは $S = s_1 + s_2$ である．

(a) この S も角運動量と同じ交換関係が成立する事を示せ．

(b) 今、問題は S^2, S_z の固有関数を作る事である．

$$\boldsymbol{S}^2 = \frac{3}{2}\hbar^2 + 2\boldsymbol{s}_1 \cdot \boldsymbol{s}_2$$

を示せ．

(c) 2粒子の波動関数

$$\Psi_{1,1} = \chi^{(1)}_{\frac{1}{2}}\chi^{(2)}_{\frac{1}{2}}, \qquad \Psi_{1,-1} = \chi^{(1)}_{-\frac{1}{2}}\chi^{(2)}_{-\frac{1}{2}}$$

を定義する時、これは、S^2, S_z の固有関数になっている事を示し、その固有値を求めよ．

(d) $\chi^{(1)}_{\frac{1}{2}}\chi^{(2)}_{-\frac{1}{2}}, \quad \chi^{(1)}_{-\frac{1}{2}}\chi^{(2)}_{\frac{1}{2}}$ は S^2 の固有関数になっていない事を示せ．

(e) 2粒子の波動関数

$$\Psi_{1,0} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\chi^{(1)}_{\frac{1}{2}}\chi^{(2)}_{-\frac{1}{2}} + \chi^{(1)}_{-\frac{1}{2}}\chi^{(2)}_{\frac{1}{2}}\right], \qquad \Psi_{0,0} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\chi^{(1)}_{\frac{1}{2}}\chi^{(2)}_{-\frac{1}{2}} - \chi^{(1)}_{-\frac{1}{2}}\chi^{(2)}_{\frac{1}{2}}\right]$$

を定義する時、これは、S^2, S_z の固有関数になっている事を示し、その固有値を求めよ．

6. 1と2の粒子を交換するオペレータを P_{12} とする．この時、任意の関数 $G(A_1, A_2)$ に対して

$$P_{12}G(A_1, A_2) = G(A_2, A_1)$$

が成り立つ．また、

$$P_{12}G(A_1, A_2) = G(A_1, A_2) \quad \text{(symmetric)} \tag{1a}$$

の時、関数 $G(A_1, A_2)$ は対称といい、

$$P_{12}G(A_1, A_2) = -G(A_1, A_2) \quad \text{(anti} - \text{symmetric)} \tag{1b}$$

の時、関数 $G(A_1, A_2)$ は反対称といい、この時、式 (1) は P_{12} の固有関数になっている．

(a) 問題5 で求めたスピン波動関数 Ψ のうちでどれが対称で、どれが反対称であるか？

(b) 問題5 で合成スピン $S = s_1 + s_2$ に対して

$$P_{12}\boldsymbol{S}P_{12}^{-1} = \boldsymbol{S}$$

を示せ．

(c) この事から、S^2, S_z の固有関数は P_{12} の固有関数で指定されているはずである．この事を、問題5 の (c), (e) の波動関数に対して確かめよ．

量子力学演習　No. 9

1. **ハミルトニアン** $\boxed{H = H_0 + H'}$ **の系を考える．ここで、**H_0 **の固有値と固有関数はわかっているものとする．すなわち、**

$$H_0 \Psi_n^{(0)} = E_n^{(0)} \Psi_n^{(0)}$$

また、H' **は** H_0 **に比べて小さいものとして、摂動で扱う．**

(a) **今、** $H = H_0 + \lambda H'$ **として、Schrödinger 方程式** $H\Psi = E\Psi$ **の** E, Ψ **を** λ **のベキで展開する．**

$$E = E_0 + \lambda E_1 + \lambda^2 E_2 + \cdots$$

$$\Psi = \Psi_0 + \lambda \Psi_1 + \lambda^2 \Psi_2 + \cdots$$

それぞれの λ **のベキを比較する事により、**

$$H_0 \Psi_0 = E_0 \Psi_0 \tag{1}$$

$$H_0 \Psi_1 + H' \Psi_0 = E_0 \Psi_1 + E_1 \Psi_0 \tag{2}$$

$$H_0 \Psi_2 + H' \Psi_1 = E_0 \Psi_2 + E_1 \Psi_1 + E_2 \Psi_0 \tag{3}$$

を示せ．

(b) **式 (1) より、**Ψ_0 **は** H_0 **の固有関数になっている．従って、この状態の波動関数とその固有値は** $\Psi_n^{(0)}$, $E_n^{(0)}$ **である．ここで、**Ψ_1 **を** $\Psi_n^{(0)}$ **で次のように展開することにより、**

$$\Psi_1 = \sum_n c_n^{(1)} \Psi_n^{(0)}$$

１次の摂動エネルギーを求める．この時、基底状態に対する１次の摂動エネルギーと展開係数 $c_n^{(1)}$ **は**

$$\boxed{E_1 = < \Psi_0^{(0)} | H' | \Psi_0^{(0)} >}$$

$$c_n^{(1)} = \frac{< \Psi_n^{(0)} | H' | \Psi_0^{(0)} >}{E_0^{(0)} - E_n^{(0)}} \qquad (n \neq 0)$$

と求まる事を示せ．

(c) **２次の摂動エネルギーを求めるために、**Ψ_2 **を**

$$\Psi_2 = \sum_n c_n^{(2)} \Psi_n^{(0)}$$

と展開する．この時、基底状態に対する２次の摂動エネルギー E_2 **は**

$$\boxed{E_2 = \sum_{n \neq 0} \frac{| < \Psi_n^{(0)} | H' | \Psi_0^{(0)} > |^2}{E_0^{(0)} - E_n^{(0)}}} \qquad \text{と求まる事を示せ．}$$

2*. **全系が** $H = H_0 + H'$ **で与えられ、** H_0 **が** 1 **次元調和振動子** $H_0 = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$ **である時を考える．**

(a) $H' = \beta x$ **(但し、**β **は定数) とした時、**H' **を摂動的に扱い、基底状態に対する** 1 **次の摂動エネルギーを求めよ．また、これを厳密に解いた場合と比較せよ．**

(b) $H' = \beta x^2$ **の時、上と同じ事を行え．**

(c) $H' = \beta x$ **の時、基底状態に対する** 2 **次の摂動エネルギーを計算せよ．また、これを厳密に解いた場合と比較せよ．但し、基底状態と** x **で結ばれる状態は** $n = 1$ **しかない事を示し、その行列要素を求める事により計算できる．**

3. **全系が** $H = H_0 + H'$ **で与えられ、** H_0 **が** 1 **次元調和振動子** $H_0 = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$ **である時を考える．**

(a) **摂動項として** $H' = V_0\delta(x)$ **が加わった時、基底状態に対する** 1 **次の摂動エネルギーを求めよ．ここで、**$\delta(x)$ **関数は**

$$\delta(x) = \begin{cases} 0 & \qquad x \neq 0 \\ \infty & \qquad x = 0 \end{cases}$$

である．また、

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x-a)dx = 1, \qquad \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x-a)f(x)dx = f(a)$$

も満たしている．

(b) **摂動項として** $H' = V_0\delta(x-a)$ **が加わった時、基底状態に対する** 1 **次の摂動エネルギーを求めよ．この** 1 **次の摂動エネルギーは** a **が大きくなると急速に小さくなる事を示し、その物理的意味を述べよ．**

4. **ハミルトニアンが** $H = H_0 + H'$ **で与えらるとし、**H_0 **の固有値と固有関数は分かっているものとする．**

(a) H_0 **の固有値** $E_0^{(0)}$ **が** $s-$ **重に縮退している時を考える．この固有値に属する独立な固有関数を** $\phi_0^{(1)}$, $\phi_0^{(2)}$, $\cdots$, $\phi_0^{(s)}$, **とする．この** s **個で張る空間で** H **を対角化することにより、エネルギーのズレを与える式を求めよ．**
(ヒント： $\Psi = \sum_{k=1}^{s} c_k \phi_0^{(k)}$ **として、永年方程式を** c_k **に対して求める．)**

(b) **縮退が** 2 **重の時** $(s = 2)$, **エネルギーのズレを具体的に求めよ．**

5*. 一様な弱い磁場の中に置かれた水素原子のエネルギー準位の変化を調べたい．但し、スピンは考えない．磁場は $z-$ 方向に一様であるとする．$\boldsymbol{B} = (0, 0, B)$

(a) 電子のハミルトニアンは

$$\boxed{H = \frac{1}{2m}\left(\boldsymbol{p} - \frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)^2 - \frac{e^2}{r}} \qquad \text{で与えられる．}$$

ここで A はベクトルポテンシャルであり、磁場 B と

$$\boldsymbol{A} = \frac{1}{2}\boldsymbol{B} \times \boldsymbol{r}$$

で結ばれている．今、 $\boldsymbol{p}$ はオペレータである事に注意して

$$H = \frac{1}{2m}\boldsymbol{p}^2 - \frac{e^2}{r} + H'$$

とした時の H' を具体的に求めよ．但し、$\boldsymbol{A}^2$ の項は無視してよい．

(b) H' を摂動で扱い、基底状態 $(1s-$ 状態) に対する 1 次の摂動エネルギーを求めよ．

(c) $2p-$ 状態に対して 1 次の摂動エネルギーを求めよ．このエネルギー準位の分裂を Zeeman 効果という．

6. 3 次元調和振動子のハミルトニアンは

$$H = \frac{1}{2m}\boldsymbol{p}^2 + \frac{1}{2}m\omega^2\boldsymbol{r}^2$$

で与えられる．

(a) 基底状態の波動関数は $\psi(\boldsymbol{r}) = Ne^{-\frac{1}{2}\alpha^2\boldsymbol{r}^2}$ であり、そのエネルギー固有値は $E = \frac{3}{2}\hbar\omega$ である．この時、この $\psi(\boldsymbol{r})$ が Schrödinger 方程式の解になっている事を示す事により α を決めよ．また、規格化することにより、 N を求めよ.

(b) 摂動項として $H' = ar$ が加わった時、基底状態に対する 1 次の摂動エネルギーを求めよ．

(c) 摂動項として $H' = b\boldsymbol{r}^2$ が加わった時、基底状態に対する 1 次の摂動エネルギーを求めよ．

(d) (c) の場合、Virial 定理を利用すると、

$$< \psi|\frac{1}{2}m\omega^2\boldsymbol{r}^2|\psi >= \frac{3}{4}\hbar\omega$$

であることから、

$$E^{(1)} =< \psi|H'|\psi >= b\left(\frac{2}{m\omega^2}\right)\left(\frac{3}{4}\hbar\omega\right)$$

と求められる事を示せ．

量子力学演習　No. 10

1. 1 次元調和振動子のハミルトニアン $H = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$ について、その最低エネルギーを変分法により以下のように求めたい．

   (a) 試行関数として、$\psi(x) = Ne^{-\frac{1}{2}\alpha^2 x^2}$ をとる．エネルギー E は

   $$\boxed{E = \frac{<\psi|H|\psi>}{<\psi|\psi>}}$$ で与えられる．この E を計算せよ．

   (b) α を変分パラメータとして、E の最小値を求めよ．

2*. 3 次元調和振動子のハミルトニアン

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}r^2\frac{d}{dr}\right) + \frac{1}{2}m\omega^2 r^2$$

について、その最低エネルギーを変分法により以下のように求めたい．但し、$s-$ 状態のみを考える．

   (a) 試行関数として、$\psi(r) = Ne^{-\alpha r}$ をとる．エネルギー E は

   $$E = \frac{<\psi|H|\psi>}{<\psi|\psi>}$$ で与えられる．この E を計算せよ．

   (b) α を変分パラメータとして、E の最小値を求めよ．

   (c) 同様の計算を試行関数として、$\psi(r) = Ne^{-\frac{1}{2}\alpha^2 r^2}$ の時に行い、E の最小値を求めよ．

   (d) 厳密に解いた 3 次元調和振動子のエネルギー E は $E = \frac{3}{2}\hbar\omega$ である．変分法によるエネルギーとの相違を論ぜよ．

3*. 水素型原子のハミルトニアン

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}r^2\frac{d}{dr}\right) - \frac{Ze^2}{r}$$

について、その最低エネルギーを変分法により以下のように求めたい．但し、$s-$ 状態のみを考える．

   (a) 試行関数として、$\psi(r) = Ne^{-\alpha r}$ をとる．エネルギー E は

   $$E = \frac{<\psi|H|\psi>}{<\psi|\psi>}$$ で与えられる．この E を計算せよ．

   (b) α を変分パラメータとして、E の最小値を求めよ．

   (c) 同様の計算を試行関数として、$\psi(r) = Ne^{-\frac{1}{2}\alpha^2 r^2}$ の時に行い、E の最小値を求めよ．

   (d) 厳密に解いた水素型原子のエネルギー E は $E = -\dfrac{mZ^2e^4}{2\hbar^2}$ である．変分法によるエネルギーとの相違を論ぜよ．

4*. $^4He-$ 原子は正電荷 $(2e)$ を持った原子核の回りを 2 個の電子が回っている系である．この系のハミルトニアンは

$$H = H_1 + H_2 + H_{12}$$

$$H_1 = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{1}{r_1^2}\frac{d}{dr_1}r_1^2\frac{d}{dr_1}\right) - \frac{2e^2}{r_1}$$

$$H_2 = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{1}{r_2^2}\frac{d}{dr_2}r_2^2\frac{d}{dr_2}\right) - \frac{2e^2}{r_2}$$

$$H_{12} = \frac{e^2}{|\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2|}$$

で与えられる．この 2 体の系の基底状態のエネルギーを近似的に求めたい．

(a) Pauli 原理によれば、フェルミオンは 1 個の状態に 1 個のフェルミオンしか入れない．しかし、2 個の電子は共に $s-$ 状態に入っている．これは、なぜだと思うか？

(b) H_{12} の項を無視する時、基底状態のエネルギー E_0 を求めよ．これは、何 eV であるか？

(c) H_{12} を摂動項として扱う時、波動関数は

$$\Psi_0(r_1, r_2) = \phi_{1s}(r_1)\phi_{1s}(r_2)$$

であり、1 次の摂動エネルギーは

$$E^{(1)} =< \Psi_0|H_{12}|\Psi_0 >$$

である．この摂動エネルギーを計算せよ．

(d) $\phi(r) = Ne^{-\alpha r}$ として、α を変分パラメータにした時、全系の最低エネルギーはいくらであるか？

5. 変分法で求めたエネルギー E はその変分波動関数が真の波動関数からかなりずれていても正しい値 E_0 に相当近いものが求められる．この事を次のステップで示したい．

(a) 正しい固有関数を ψ_0 とし、変分関数 ψ は ψ_0 から

$$\psi = \psi_0 + \epsilon\psi_1$$

だけずれているとする．但し、$\epsilon << 1$ である．また $< \psi_0|\psi_1 >= 0$ とする．この時、

$$E = \frac{< \psi|H|\psi >}{< \psi|\psi >}$$

を ϵ の 2 次の大きさまで求め、 ϵ の 1 次の大きさが無い事を示せ．

(b) このことより、変分法で求めたエネルギーは波動関数の不正確さ以上に正しくもとまる事を示せ．

量子力学演習　No. 11

1. 量子力学においては、状態はその固有値で指定されるため波動関数の座標を陽には書かない場合がある．このため、波動関数を座標表示で書いたもの $\phi(x)$ と運動量表示で書いたもの $\tilde{\phi}(p)$ の関係式が必要になる．この 2 つの波動関数は Fourier 変換で結ばれている．

$$\tilde{\phi}(p) = \int e^{\frac{i}{\hbar}px}\phi(x)dx$$

但し、ここでの議論は 1 次元に限定している．

(a) $\delta-$ 関数を

$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi\hbar}\int e^{\frac{i}{\hbar}px}dp$$

とする時， $\phi(x)$ を $\tilde{\phi}(p)$ で表せ．

(b) $\tilde{\phi}(p)$ はどのように規格化されているか？

(c) 1 次元調和振動子の Schrödinger 方程式は

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2\right)\phi(x) = E\phi(x)$$

であった．これを $\tilde{\phi}(p)$ に対する方程式に書き換えよ．

(d) $\tilde{\phi}(p)$ に対する方程式を解く事により、基底状態の $\tilde{\phi}(p)$ を求めよ．

(e) No. 4 で求めた基底状態の $\phi(x)$ を用いて $\tilde{\phi}(p)$ を求めよ．これと、(d) で求めたものが一致する事を確かめよ．

2. No. 4 の問題 6 でみたように、調和振動子において a, $a^\dagger$ は生成、消滅演算子になっている．ここで 消滅演算子 a を基底状態 $|\phi_0>$ にオペレートすると、

$$a|\phi_0>= 0$$

である．

(a) いま、数表示から $x-$ 表示に上式を書き直すと、

$$\left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x + \frac{\hbar}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\frac{\partial}{\partial x}\right)<x|\phi_0>= 0$$

となる．ここで、$<x|\phi_0>$ は通常の波動関数 $\phi_0(x) =<x|\phi_0>$ に対応している．この微分方程式を解く事により、規格化された波動関数 $\phi_0(x)$ を求めよ．

(b) 第一励起状態 $n = 1$ は

$$\phi_1(x) =<x|a^\dagger|\phi_0>= \left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x - \frac{\hbar}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\frac{\partial}{\partial x}\right)<x|\phi_0>$$

で求められる．規格化された波動関数 $\phi_1(x)$ を求めよ．

3*. **スピンを理解するためにはどうしても相対論的量子力学を学ぶ必要がある．ここでは、簡単な問題を通してスピンを理解して行きたい．**

(a) **質量** m **の粒子のエネルギー** E **と運動量** p **の関係は** Einstein **によって与えられているように**

$$E = \sqrt{\boldsymbol{p}^2 c^2 + m^2 c^4} \tag{1}$$

である．ここで、 c **は光速である．**Schrödinger **方程式はエネルギー** E **と運動量** p **をオペレータであるとして**

$$E \to i\hbar \frac{\partial}{\partial t}, \quad \boldsymbol{p} \to -i\hbar \nabla \tag{2}$$

と置き換えることにより、$E = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}$ **から**

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi$$

と求められた．Einstein **の関係式** (1) **から、**E **と** p **をオペレータであるとして方程式を求めると**

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \sqrt{m^2 c^4 - \hbar^2 c^2 \nabla^2} \psi$$

である．この式は何処に問題があると思うか？

(b) **式** (1) **は** 2 **乗すると**

$$E^2 = \boldsymbol{p}^2 c^2 + m^2 c^4 \tag{3}$$

である．この時、式 (2) **の置き換えを行い、方程式を求めると**

$$\hbar^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} - \hbar^2 c^2 \nabla^2 \psi + m^2 c^4 \psi = 0$$

となり、Klein-Gordon **方程式という．この方程式ではスピンがどうなっていると思うか？**

(c) Dirac **は式** (3) **を因数分解する事を考えたのであるが、この式は以下のように書き直すことが出来る．**

$$(E - \alpha_x p_x c - \alpha_y p_y c - \alpha_z p_z c - \beta mc^2)(E + \alpha_x p_x c + \alpha_y p_y c + \alpha_z p_z c + \beta mc^2) = 0 \tag{4}$$

この時、α_x, α_y, α_z, β **が** 4 **行** 4 **列の行列であるとし、また次の形で書けるとき式** (4) **は式** (3) **に帰着される事を示せ．**

$$\alpha_x = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_x \\ \sigma_x & 0 \end{pmatrix}, \ \alpha_y = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_y \\ \sigma_y & 0 \end{pmatrix}, \ \alpha_z = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_z \\ \sigma_z & 0 \end{pmatrix}, \ \beta = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix}$$

但し、σ_x, σ_y, σ_z **は** Pauli **行列、** I **は** 2 **行** 2 **列の単位行列である．**

(d) これより、質量 m の自由粒子の Dirac 方程式は

$$(\alpha_x p_x c + \alpha_y p_y c + \alpha_z p_z c + \beta mc^2)\Psi = E\Psi$$

となる．この時、Ψ は 4 列のベクトルであり、そのうちの 2 つの成分がスピンに対応する．あとの 2 個は何の自由度であると思うか ？

(e) 自由粒子の Dirac 方程式のハミルトニアンは

$$H = \alpha_x p_x c + \alpha_y p_y c + \alpha_z p_z c + \beta mc^2$$

である．この時、このハミルトニアンと角運動量 L_x、スピン $s_x = \frac{\hbar}{2}\sigma_x$ との交換関係 $[H, L_x]$, $[H, s_x]$ を計算せよ．また、$j_x = L_x + s_x$ とする時 $[H, j_x] = 0$ を示せ．

4. $^4He-$ 原子を考えた時、2 つの電子は $1s-$ 軌道に入った．

(a) この波動関数 $\Psi = \phi_{1s}(r_1)\phi_{1s}(r_2)$ は 1 と 2 の入れ替えに対して対称か反対称か？

(b) Pauli 原理によれば、2 つの電子の波動関数は反対称でなければならない．このためには、スピン空間で反対称な波動関数を作らねばならない．No. 8 の問題 5 で求めたどのスピン波動関数が反対称であるか？また、そのスピンはいくらか ?

5. 質量 m の粒子による 1 次元の散乱問題を考える．ここで、散乱ポテンシャル $U(x)$ は

$$U(x) = \begin{cases} 0 & : \quad x < 0 \\ U_0 & : 0 < x < a \\ 0 & : \quad a < x \end{cases}$$

ここで、 U_0 は正である．但し、散乱問題では、束縛状態のエネルギー固有値を求める問題と異なり、波動関数に対する境界条件を課さないで、散乱波が入射波とどのように結びついているかを決定する．

(a) このポテンシャルの場合の Schrödinger 方程式を書き、その固有関数 $u(x)$ を $x < 0$ の領域に対して求めたい．但し、$x < 0$ の領域に対しては、波動関数は入射波と反射波で成り立っており、

$$u(x) = e^{ikx} + Ae^{-ikx}$$

の形になっており、入射エネルギーは E である. k を E で表せ．

(b) $0 < x < a$ の領域では、入射エネルギーは E が U_0 より大きい場合と小さい場合に分けて波動関数の形を決定せよ．

(c) $a < x$ の場合は、透過波のみが存在する．

$$u(x) = Be^{ikx}$$

この時、それぞれの領域の波動関数を接続する事により、反射確率 $|A|^2$ と透過確率 $|B|^2$ を求めよ．

量子力学演習　No. 12

1*.　**WKB 法（準古典近似）について考察しよう．1 次元 Schrödinger 方程式**

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+V(x)\right)u(x)=Eu(x)$$

を解く時、$u(x)=Ae^{\frac{i}{\hbar}S(x)}$ とおいて $S(x)$ に対する方程式に書き直す．ここで、 A は定数とする．

(a) S **を** $\hbar$ **でベキ展開する**

$$S=S_0+\hbar S_1+\hbar^2 S_2+\cdots$$

このうち、 S_0, S_1 だけを取る近似を WKB 法という．この時、

$$\left(\frac{dS_0}{dx}\right)^2=2m(E-V(x)) \tag{1}$$

$$i\frac{d^2S_0}{dx^2}-2\frac{dS_0}{dx}\frac{dS_1}{dx}=0 \tag{2}$$

を示せ．

(b) **この解は**

(i) $E>V(x)$ **の時**

$$S_0(x)=\pm\int^x p(x')dx'$$
$$S_1(x)=\frac{1}{2}i\ln p(x),\quad p(x)=\sqrt{2m(E-V)}$$

(ii) $E<V(x)$ **の時**

$$S_0(x)=\pm i\int^x q(x')dx'$$
$$S_1(x)=\frac{1}{2}i\ln q(x),\quad q(x)=\sqrt{2m(V-E)}$$

となる事を示せ．

(c) **Schrödinger 方程式を準古典近似して得られた式（1）は Newton 方程式に対応するはずである．式（1）は古典力学とどのような対応があるのか論ぜよ．**

(注) **Hamilton-Jacobi の方程式は作用を S とした時、**

$$\frac{\partial S}{\partial t}+H=0$$

であった．ここで、$S=-Et+S_0$ を代入すると $E=H$ であり、

$$H=\frac{p^2}{2m}+V(x)$$

において $p=\dfrac{\partial S_0}{\partial x}$ を代入する事により時間に依存しない Hamilton-Jacobi の方程式が得られる．

2*. WKB 法により、No. 11 問５の問題の透過係数を計算したい．ここでは、 $E < U_0$ の場合に限る．

(a) 入射波の波動関数 $u(x)$ は $x < 0$ では

$$u(x) = e^{ikx}$$

であり、透過波の波動関数は $x > a$ では

$$u(x) = Be^{ikx}$$

であった．$0 < x < a$ の領域の波動関数は WKB 法で与えられ、

$$u(x) = Ce^{-\frac{1}{\hbar}\int_b^x q(x')dx'}, \qquad q(x) = \sqrt{2m(U_0 - E)}$$

で与えられている．この時、$u(x)$ に対して $x = 0$ と $x = a$ での接続条件より、B を求めよ．

(b) No. 11 問５の問題で求めた透過係数と比較せよ．ただし、No. 11 問５の問題の解において、$|U_0 - E| << E$ の近似をして良い．

3**. ポテンシャルが無い場合の 1 次元 Schrödinger 方程式

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2u(x)}{dx^2} = Eu(x)$$

を $-\frac{L}{2} \leq x \leq \frac{L}{2}$ の範囲に閉じ込めた場合を考える．

(a) この一般解は

$$u(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, \qquad k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

である．ここで、この解が運動量の固有関数になる事を要求すると $u(x)$ は

$$u(x) = Ae^{ikx}$$

となる．この時、 $u(x)$ に対して周期的境界条件を課したとき、k に対する条件を求めると

$$k = \frac{2\pi}{L}n, \qquad n = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots$$

となる事を示せ．

(b) 量子化条件は

$$\hat{p}x - x\hat{p} = -i\hbar$$

であった．この両辺を上で求めた状態

$$u_n(x) = \frac{1}{\sqrt{L}}e^{i\frac{2\pi n}{L}x}$$

で期待値をとる．この時、運動量演算子 $\hat{p}$ のエルミート性を仮定すると

$$(n - m)\frac{2\pi\hbar}{L} < u_n|x|u_m >= -i\hbar\delta_{nm} \tag{3}$$

と求まる事を示せ．

(c) 式（3）は $n = m$ の時、明らかに矛盾している．この矛盾は運動量演算子 $\hat{p}$ のエルミート性が周期的境界条件のもとでは一般的に使えない事によっている事を示せ．

Appendix I

(A) １次元調和振動子の波動関数

エネルギー： $E_n = \left(n + \dfrac{1}{2}\right)\hbar\omega, \quad n = 0, 1, 2 \cdots$

$$\alpha = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$$

(a) $n = 0$

$$\psi_0(x) = \left(\frac{\alpha^2}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 x^2}$$

(b) $n = 1$

$$\psi_1(x) = \left(\frac{\alpha^2}{4\pi}\right)^{\frac{1}{4}} (2\alpha x) e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 x^2}$$

(c) $n = 2$

$$\psi_1(x) = \left(\frac{\alpha^2}{64\pi}\right)^{\frac{1}{4}} \left[4(\alpha x)^2 - 2\right] e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 x^2}$$

(d) **一般の** n

$$\psi_n(x) = \left(\frac{\alpha^2}{4^n \pi (n!)^2}\right)^{\frac{1}{4}} H_n(\alpha x) e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 x^2}$$

但し $\quad H_n(\xi) = (-)^n e^{\xi^2} \dfrac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2}$

$H_0(\xi) = 1$

$H_1(\xi) = 2\xi$

$H_2(\xi) = 4\xi^2 - 2$

$H_3(\xi) = 8\xi^3 - 12\xi$

$H_4(\xi) = 16\xi^4 - 48\xi^2 + 12$

(B) 水素原子

Bohr 半径 : $\quad a_0 = \dfrac{\hbar^2}{me^2} = 0.529 \times 10^{-8}$ **cm**

エネルギー : $\quad E_n = -\dfrac{mZ^2e^4}{2n^2\hbar^2} = -\dfrac{m}{2n^2}\left(\dfrac{Z}{137}\right)^2 \qquad$ **:** $m = 0.511 \quad [\mathbf{MeV}/c^2]$

波動関数:

$$\psi(\boldsymbol{r}) = R_{n\ell}(r) Y_{\ell m}(\theta, \varphi)$$

(a) 1s 状態

$$R_{1s}(r) = \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} 2e^{-\frac{Zr}{a_0}}, \qquad Y_{00}(\theta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$$

(b) 2p 状態

$$R_{2p}(r) = \left(\frac{Z}{2a_0}\right)^{\frac{3}{2}} \frac{Zr}{\sqrt{3}a_0} e^{-\frac{Zr}{2a_0}}$$

$$\begin{cases} Y_{11}(\theta, \varphi) = -\sqrt{\dfrac{3}{8\pi}} \sin\theta e^{i\varphi} \\ Y_{10}(\theta, \varphi) = \sqrt{\dfrac{3}{4\pi}} \cos\theta \\ Y_{1-1}(\theta, \varphi) = \sqrt{\dfrac{3}{8\pi}} \sin\theta e^{-i\varphi} \end{cases}$$

(c) 2s 状態

$$R_{2s}(r) = \frac{1}{2\sqrt{2}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} \left(2 - \frac{Zr}{a_0}\right) e^{-\frac{Zr}{2a_0}}, \qquad Y_{00}(\theta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$$

(C) 積分公式

(a) Exponential の積分

$$\int_0^\infty e^{-\alpha x}dx = \frac{1}{\alpha}, \qquad \int_0^\infty x e^{-\alpha x}dx = \frac{1}{\alpha^2}, \qquad \int_0^\infty x^2 e^{-\alpha x}dx = \frac{2}{\alpha^3}$$

$$\int_0^\infty x^n e^{-\alpha x}dx = (-1)^n \frac{\partial^n}{\partial \alpha^n}\frac{1}{\alpha} = \frac{n!}{\alpha^{n+1}}$$

(b) Gaussian の積分

$$\int_{-\infty}^\infty e^{-\alpha^2 x^2}dx = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha^2}}, \qquad \int_{-\infty}^\infty x^2 e^{-\alpha^2 x^2}dx = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{\alpha^6}}, \qquad \int_{-\infty}^\infty x^4 e^{-\alpha x^2}dx = \frac{3}{4}\sqrt{\frac{\pi}{\alpha^{10}}}$$

e

$$\int_{-\infty}^\infty x^{2n} e^{-\beta x^2}dx = (-1)^n \frac{\partial^n}{\partial \beta^n}\sqrt{\frac{\pi}{\beta}} = \frac{(2n-1)!!\sqrt{\pi}}{2^n \beta^{n+\frac{1}{2}}}$$

[**但し、** $(2n-1)!! = 1 \times 3 \times \cdots \times (2n-1)$]

(c) Gaussian の積分 (奇関数) [積分区間に注意]

$$\int_{-\infty}^\infty x^{2n+1} e^{-\beta x^2}dx = 0$$

$$\int_0^\infty x^{2n+1} e^{-\beta x^2}dx = \frac{1}{2}\frac{n!}{\beta^{n+1}}$$

Appendix II

1. 微分

(a) 微分の定義

$$\frac{df}{dx} \equiv \lim_{\Delta x \to 0} \frac{f(x+\Delta x) - f(x)}{\Delta x} = \lim_{\Delta x \to 0} \frac{\Delta f}{\Delta x} \qquad (*)$$

(b) 合成微分

$$\frac{df(u(x))}{dx} = \frac{df}{du}\frac{du}{dx} \qquad (*)$$

（例）： $f(u) = u^2$, $\quad u(x) = e^x$

公式 (*) より

$\frac{df(u(x))}{dx} = \frac{df}{du}\frac{du}{dx} = 2ue^x = 2e^{2x}$

一方 直接計算すると $\quad f(x) = u^2 = e^{2x}$ **より** $\frac{df(u(x))}{dx} = 2e^{2x}$

(c) 偏微分

$$\frac{\partial f(x,y)}{\partial x} \equiv y \text{ をとめて } x \text{ で微分} \qquad (*)$$

（例）： $f(x,y) = x^n y^n \qquad \frac{\partial f(x,y)}{\partial x} = nx^{n-1}y^n$

(d) 全微分

$f(x(t), y(t), t)$ **のとき**

$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial x}\frac{dx}{dt} + \frac{\partial f}{\partial y}\frac{dy}{dt} + \frac{\partial f}{\partial t} \qquad (*)$$

（例）： $f(x(t), y(t), t) = x^2y^2e^{at}$

$x = \sin t, \quad y = \cos t$

公式 (*) より

$\frac{df}{dt} = 2xy^2e^{at}\cos t - 2yx^2e^{at}\sin t + ax^2y^2e^{at}$

$\qquad = \sin 2t \cos 2te^{at} + \frac{1}{4}a(\sin 2t)^2e^{at}$

一方 直接計算すると

$f(x(t), y(t), t) = \sin^2 t \cos^2 te^{at} = \frac{1}{4}(\sin 2t)^2e^{at}$

$\frac{df}{dt} = \sin 2t \cos 2te^{at} + \frac{1}{4}a(\sin 2t)^2e^{at}$

1. 合成変換

$(x,y) \to (u,v)$ **namely** $(u(x,y), v(x,y))$

$$du = \frac{\partial u}{\partial x}dx + \frac{\partial u}{\partial y}dy \qquad (*)$$

$$dv = \frac{\partial v}{\partial x}dx + \frac{\partial v}{\partial y}dy \qquad (*)$$

$$\frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial u}{\partial x}\frac{\partial}{\partial u} + \frac{\partial v}{\partial x}\frac{\partial}{\partial v} \qquad (*)$$

$$\frac{\partial}{\partial y} = \frac{\partial u}{\partial y}\frac{\partial}{\partial u} + \frac{\partial v}{\partial y}\frac{\partial}{\partial v} \qquad (*)$$

2. Grassmann 代数

a, b **に対して**

$$a * b = -b * a \qquad (*)$$

とする．また結合法則と分配法則が成立するとする．
微分 du, dv **等は Grassmann 代数で扱うと便利である．**

$$\begin{aligned} du * dv &= \left(\frac{\partial u}{\partial x}dx + \frac{\partial u}{\partial y}dy\right) * \left(\frac{\partial v}{\partial x}dx + \frac{\partial v}{\partial y}dy\right) && (1) \\ &= \left(\frac{\partial u}{\partial x}\frac{\partial v}{\partial y} - \frac{\partial u}{\partial y}\frac{\partial v}{\partial x}\right)dx * dy \qquad (*) && (2) \\ J &= \frac{\partial u}{\partial x}\frac{\partial v}{\partial y} - \frac{\partial u}{\partial y}\frac{\partial v}{\partial x} \qquad (*) && (3) \end{aligned}$$

J **を Jacobian という．**

$$J = \begin{vmatrix} \frac{\partial u}{\partial x} & \frac{\partial u}{\partial y} \\ \frac{\partial v}{\partial x} & \frac{\partial v}{\partial y} \end{vmatrix} \qquad (*)$$

3. 変数変換

(a) $(x, y, z) \to (r, \theta, \phi)$

$$\begin{aligned}
x &= r\sin\theta\cos\phi && (4)\\
y &= r\sin\theta\sin\phi && (5)\\
z &= r\cos\theta && (6)\\
dx &= \sin\theta\cos\phi dr + r\cos\theta\cos\phi d\theta - r\sin\theta\sin\phi d\phi && (7)\\
dy &= \sin\theta\sin\phi dr + r\cos\theta\sin\phi d\theta + r\sin\theta\cos\phi d\phi && (8)\\
dz &= \cos\theta dr - r\sin\theta d\theta && (9)\\
dr &= \sin\theta\cos\phi dx + \sin\theta\sin\phi dy + \cos\theta dz && (10)\\
rd\theta &= \cos\theta\cos\phi dx + \cos\theta\sin\phi dy - \sin\theta dz && (11)\\
r\sin\theta d\phi &= -\sin\phi dx + \cos\phi dy && (12)
\end{aligned}$$

これより Jacobian J を求めよ．

(解): $J = r^2 \sin\theta$

(b) 微分演算子ラプラシアン $\Delta \equiv \boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{\nabla}$

$$\begin{aligned}
\Delta &= \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \qquad (*) && (13)\\
\Delta &= \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2}\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{r^2\sin\theta^2}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2} \qquad (*) && (14)\\
\Delta &= \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}r\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \qquad (*) && (15)
\end{aligned}$$

(c) 微小距離 $(ds)^2$

Cartesian Coordinates : $(ds)^2 = (dx)^2 + (dy)^2 + (dz)^2 \qquad (*)$

Polar Coordinates : $(ds)^2 = (dr)^2 + (rd\theta)^2 + (r\sin\theta d\phi)^2 \qquad (*)$

Circular Coordinates : $(ds)^2 = (dr)^2 + (rd\theta)^2 + (dz)^2 \qquad (*)$

(d) Taylor 展開

$$f(a+x) = f(a) + f^{'}(a)x + \frac{1}{2}f^{''}(a)x^2 + \cdots + \frac{1}{n!}f^{(n)}(a)x^n + \cdots \qquad (*)$$

（例）：

$$\begin{aligned}
(1+x)^\alpha &= 1 + \alpha x + \frac{1}{2}\alpha(\alpha-1)x^2 + \cdots \qquad (*) && (16)\\
\sqrt{1+x} &= 1 + \frac{1}{2}x - \frac{1}{8}x^2 + \cdots \qquad (*) && (17)\\
\frac{1}{1+x} &= 1 - x + x^2 - x^3 + \cdots \qquad (*) && (18)\\
\ln(1+x) &= x - \frac{1}{2}x^2 + \frac{1}{3}x^3 - \frac{1}{4}x^4 + \cdots \qquad (*) && (19)\\
e^x &= 1 + x + \frac{1}{2}x^2 + \cdots \qquad (*) && (20)\\
\sin x &= x - \frac{1}{6}x^3 + \cdots \qquad (*) && (21)\\
\cos x &= 1 - \frac{1}{2}x^2 + \cdots \qquad (*) && (22)
\end{aligned}$$

****Euler の公式**

$$e^{i\theta} = \cos\theta + i\sin\theta \qquad (*)$$

****Taylor 展開を使って Euler の公式を証明せよ．**

4. 微分方程式

Definition:

$$\dot{u} = \frac{du}{dt}, \qquad u^{'} = \frac{du}{dx} \qquad (*)$$

(a) **（例 1）**

$$\ddot{u} + \omega^2 u = 0 \qquad (*)$$

(解): Put $u = e^{at}$. Then

$$(a^2 + \omega^2)e^{at} = 0$$

$a = \pm i\omega$

Therefore, u has two solutions.

$u = e^{i\omega}, e^{-i\omega}$

A general solution must be a linear combination of the two solutions.

$$u = Ae^{i\omega} + Be^{-i\omega}$$

From Euler's formula ($e^{i\theta} = \cos\theta + i\sin\theta$),

$$u = A'\sin\omega t + B'\cos\omega t$$

Note: A, B, A' and B' are arbitary constants which should be determined from the initial condition.

(b) **（例 2）**

$$\ddot{u} = f(u) = \frac{\partial g}{\partial u} \qquad (*)$$

(解): Multiply $\dot{u}$ to the both sides above.

$$\dot{u}\ddot{u} = \dot{u}\frac{\partial g}{\partial u}$$

$$\frac{1}{2}\frac{d\dot{u}^2}{dt} = \frac{dg}{dt}$$

$$\frac{1}{2}\dot{u}^2 = g + C$$

$$\frac{du}{\sqrt{2(g(u) + C)}} = dt$$

(c) **（例 3）**

Linear Differential Equation:

$$a_n \frac{d^n u}{dt^n} + \cdots + a_1 \frac{du}{dt} + a_0 u = 0$$

(解):

Put $u = e^{\alpha t}$ **. Then**

$$a_n \alpha^n + \cdots + a_1 \alpha + a_0 = 0$$

The solutions are given as
$u_1 = e^{\alpha_1 t}, \cdots, u_n = e^{\alpha_n t}$ **.**
Therefore, general solutions are described

$$u = c_1 e^{\alpha_1 t} + \cdots + c_n e^{\alpha_n}$$

Here, α_n **are roots of the equation.**

5. ベクトル

Definition: $\boldsymbol{a} = (a_1, a_2, \cdots, a_n)$

****空間が３次元のとき****

内積 $\boldsymbol{a} \cdot \boldsymbol{b} = a_x b_x + a_y b_y + a_z b_z$

$$\begin{aligned} \boldsymbol{a} \times \boldsymbol{b} &= \begin{vmatrix} \mathbf{e_x} & \mathbf{e_y} & \mathbf{e_z} \\ a_x & a_y & a_z \\ b_x & b_y & b_z \end{vmatrix} \qquad (*) \qquad (23) \\ &= (a_y b_z - a_z b_y)\mathbf{e_x} + (a_z b_x - a_x b_z)\mathbf{e_y} + (a_x b_y - a_y b_x)\mathbf{e_z} \qquad (*) \qquad (24) \end{aligned}$$

絶対値 $\mid \boldsymbol{a} \mid = \sqrt{a_x^2 + a_y^2 + a_z^2}$

1. 行列

*** n 次正方行列 *** $A = \{A_{ij}\}, i = 1, \cdots, n \qquad j = 1, \cdots, n$

複素共役 $(A^*)_{ij} = A^*_{ij}$

***転置行列 *** $(A^t)_{ij} = A_{ji}$

エルミート $(A^\dagger)_{ij} = A^*_{ji}$

***エルミート行列 *** $A = A^\dagger$

*** 行列式 ***

$$\det(A) \equiv \sum_P \epsilon_{(m_1 \cdots m_n)} A_{1m_1} \cdots A_{nm_n} \qquad (*)$$

where $\epsilon_{(m_1 \cdots m_n)}$ is $+1$ for even permutation and -1 for odd permutation.

*****公式*****

$$\det(AB) = \det(A)\det(B) \qquad (*)$$

トレース** Tr **

$$\mathrm{Tr}A \equiv \sum_{i=1}^{n} A_{ii} \qquad (*)$$

*****公式*****

$$\mathrm{Tr}(AB) = \mathrm{Tr}(BA) \qquad (*)$$

$$\det(A) = \exp(\mathrm{Tr} \ln A) \qquad (*)$$

証明： Assume that A depends on x, and make its derivative.

$\frac{d\det(A(x))}{dx} = \sum_{ij} \Delta_{ij} \frac{dA(x)_{ij}}{dx} = \sum_{ij} \det(A(x))(A^{-1})_{ji} \frac{dA(x)_{ij}}{dx} = \det(A(x))\mathrm{Tr}(A^{-1}\frac{dA}{dx})$

By putting $A(x) = e^{xB}$ with B a constant matrix, we obtain

$\frac{d\det(e^{xB})}{dx} = \det(e^{xB})\mathrm{Tr}(e^{-xB}e^{xB}B) = \det(e^{xB})\mathrm{Tr}(B)$

This differential equation can be solved easily with the following solution,

$\ln\det(e^{xB}) = x\mathrm{Tr}(B) + C$. **From $x = 0$, we find $C = 0$.**

Thus, we obtain $\det(e^{xB}) = e^{x\mathrm{Tr}(B)}$.

By putting $x = 1$ and $A = e^B$, we find $\det(A) = e^{\mathrm{Tr}(\ln A)}$

2. 固有値と固有関数

$$A\boldsymbol{u} = a\boldsymbol{u}$$

a: **固有値** $\boldsymbol{u}$: **固有関数**

$$\boldsymbol{u} = \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ u_n \end{bmatrix}$$

成分で書くと

$$\sum_{j=1}^{n} A_{ij} u_j = a u_i$$

*****固有値の求め方*****

$$\sum_{j=1}^{n} (A_{ij} u_j - a u_i) = 0 \qquad (*)$$

$$\sum_{j=1}^{n} (A_{ij} - a\delta_{ij}) u_i = 0 \qquad (*)$$

Here δ_{ij} **is** 1 **for** $i = j$ **and** 0 **for** $i \neq j$**.**
これは u_j **に対する連立方程式である．** $u_j \neq 0$ **の解があるためには**

$$\det(A_{ij} - a\delta_{ij}) = 0 \qquad (*)$$

[1.] **Any eigenvalue of Hermite matrix must be real.** **
(解):

$$(\boldsymbol{u}, A\boldsymbol{u}) = a \mid \boldsymbol{u} \mid^2 = (A^\dagger \boldsymbol{u}, \boldsymbol{u}) = (A\boldsymbol{u}, \boldsymbol{u}) = (a\boldsymbol{u}, \boldsymbol{u}) = a^* \mid \boldsymbol{u} \mid^2$$

Therefore, we obtain $a = a^*$ **which means** a **is real.**

[2.] **The determinant of any unitary matrix is** ± 1. **
(解):

$$\det(U^\dagger U) = 1$$

On the other hand,

$$\begin{aligned} \det(U^\dagger) &= \sum_P \epsilon_{(m_1 \cdots m_n)} A^*_{m_1 1} \cdots A^*_{m_n n} && (25) \\ &= (\sum_P \epsilon_{(m_1 \cdots m_n)} A_{m_1 1} \cdots A_{m_n n})^* && (26) \\ &= (\sum_P \epsilon_{(m_1 \cdots m_n)} A_{1 m_1} \cdots A_{n m_n})^* = (\det(U))^* && (27) \end{aligned}$$

$$\mid \det(U) \mid^2 = 1, \qquad \mid \det(U) \mid = \pm 1$$

3. 部分積分

Using the identity

$$(fg)' = f'g + fg'$$

Putting $f' = F$,

$$\int F g dx = fg - \int f g' dx \qquad (*)$$

****example****

$$\int \ln x dx = x \ln x - x - C$$

量 子 力 学 演 習

解　答

1. (a)

$$\sigma_x^2 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = 1$$

同様に $\sigma_y^2 = \sigma_z^2 = 1$

(b)

$$[\sigma_x, \sigma_y] = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = 2i\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$= 2i\sigma_z$　同様に $[\sigma_y, \sigma_z] = 2i\sigma_x$

$[\sigma_z, \sigma_x] = 2i\sigma_y$

(c)

$$\{\sigma_x, \sigma_y\} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = 0$$

他も同様にして $\{\sigma_y, \sigma_z\} = \{\sigma_z, \sigma_x\} = 0$

(d)

$$\begin{cases} \sigma_x u = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = v \\ \sigma_x v = u \end{cases}$$

$$\begin{cases} \sigma_y u = i v \\ \sigma_y v = -i u \end{cases} \qquad \begin{cases} \sigma_z u = u \\ \sigma_z v = -v \end{cases}$$

(e)

$$\begin{cases} \sigma_z u = u \\ \sigma_z v = -v \end{cases}$$

固有値は 1

-1

2. (a)

$$\left[\frac{\partial}{\partial x}, x\right]\Psi(x) = \frac{\partial}{\partial x}(x\Psi) - x\frac{\partial \Psi}{\partial x} = \Psi + x\frac{\partial \Psi}{\partial x} - x\frac{\partial \Psi}{\partial x} = \Psi(x)$$

(b)

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial x^2}, x\right]\Psi(x) = \frac{\partial^2}{\partial x^2}(x\Psi) - x\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = \frac{\partial}{\partial x}\left(x\frac{\partial \Psi}{\partial x} + \Psi\right) - x\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2}$$

$$= \frac{\partial \Psi}{\partial x} + x\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial \Psi}{\partial x} - x\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = 2\frac{\partial \Psi}{\partial x}$$

(c)

$$\left[\frac{\partial}{\partial x}, e^x\right]\Psi(x) = \frac{\partial}{\partial x}(e^x\Psi) - e^x\frac{\partial \Psi}{\partial x} = e^x\Psi + e^x\frac{\partial \Psi}{\partial x} - e^x\frac{\partial \Psi}{\partial x}$$

$$= e^x\Psi(x)$$

(d) $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x)$

(i) $[\hat{H}, x]\Psi(x) = [-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + U, x]\Psi(x)$

$= -\frac{\hbar^2}{2m}[\frac{\partial^2}{\partial x^2}, x]\Psi(x) = -\frac{\hbar^2}{m}\frac{\partial \Psi}{\partial x}$

(ii) $[\hat{H}, \hat{p}]\Psi(x) = [-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x), -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}]\Psi(x)$

$= U(x)\left(-i\hbar\frac{\partial \Psi}{\partial x}\right) - \left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}(U\Psi)\right)$

$= -i\hbar U\frac{\partial \Psi}{\partial x} + i\hbar\left(\frac{\partial U}{\partial x}\Psi + U\frac{\partial \Psi}{\partial x}\right) = i\hbar\frac{\partial U}{\partial x}\Psi(x)$

(iii) $[\hat{H}, x^2]\Psi(x) = [-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x), x^2]\Psi(x)$

$= -\frac{\hbar^2}{2m}[\frac{\partial^2}{\partial x^2}, x^2]\Psi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\left\{\frac{\partial}{\partial x}\left(2x\Psi + x^2\frac{\partial \Psi}{\partial x}\right) - x^2\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2}\right\}$

$= -\frac{\hbar^2}{2m}\left(2\Psi + 4x\frac{\partial \Psi}{\partial x}\right)$

(iv) $[\hat{H}, \hat{p}^2] = [-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + U, -\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial x^2}]\Psi(x)$

$= U\left(-\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi\right) + \hbar^2\frac{\partial^2}{\partial x^2}\left(U(x)\Psi(x)\right)$

$= -\hbar^2 U(x)\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \hbar^2\left[\frac{\partial^2 U}{\partial x^2}\Psi + \frac{\partial U}{\partial x}\frac{\partial \Psi}{\partial x} + \frac{\partial U}{\partial x}\frac{\partial \Psi}{\partial x} + U\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2}\right]$

$= \hbar^2\left[\frac{\partial^2 U}{\partial x^2}\Psi(x) + 2\frac{\partial U}{\partial x}\frac{\partial \Psi}{\partial x}\right]$

3. (a) 左辺 $= [A, BC] = ABC - BCA$

右辺 $= [A,B]C + B[A,C] = ABC - BAC + BAC - BCA$

$= ABC - BCA$ で一致する.

(b) $[A, B^2] = [A,B]B + B[A,B] = 2\hbar B$

(c) $[A, B^n] = [A, B]B^{n-1} + B[A, B^{n-1}] = \hbar B^{n-1} + B[A, B^{n-1}]$

$= \hbar B^{n-1} + B\{[A, B]B^{n-2} + B[A, B^{n-2}]\}$

$= 2\hbar B^{n-1} + B[A, B^{n-2}]$ なので

$[A, B^n] = n\hbar B^{n-1}$ と予測できる.

[帰納法]

$n=k$: $[A, B^k] = \hbar k B^{k-1}$ を仮定する. この時

$n=k+1$ については $[A, B^{k+1}] = \hbar B^k + B[A, B^k] = \hbar B^k + \hbar k B^k$

$= (k+1)\hbar B^k$ で成立している

一方 $k=1$ のときは明らかに成立しているので

帰納法により $[A, B^n] = n\hbar B^{n-1}$ が示された

4. (a) エルミートの条件 : $\langle \Psi_1 | \hat{A} \Psi_2 \rangle = \langle \hat{A} \Psi_1 | \Psi_2 \rangle$

x : $\langle \Psi_1 | x | \Psi_2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_1^*(x)\, x\, \Psi_2(x)\, dx$

$= \int_{-\infty}^{\infty} (x\Psi_1(x))^* \Psi_2(x)\, dx$

$= \langle x\Psi_1 | \Psi_2 \rangle$ ∴ エルミート

$\frac{\partial}{\partial x}$: $\langle \Psi_1 | \frac{\partial}{\partial x} \Psi_2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_1^*(x) \frac{\partial}{\partial x} \Psi_2(x)\, dx$

$= \left[\Psi_1^* \Psi_2\right]_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{\partial}{\partial x} \Psi_1^*(x)\right) \Psi_2\, dx$

$= -\langle \frac{\partial}{\partial x} \Psi_1 | \Psi_2 \rangle$ ∴ エルミートではない.

$\frac{\partial^2}{\partial x^2}$: $\langle \Psi_1 | \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi_2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_1^* \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi_2\, dx$ (2回部分積分して)

$= \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi_1^*\right) \Psi_2(x)\, dx = \langle \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi_1 | \Psi_2 \rangle$

エルミート

(b) α が純虚数であればよい $\boxed{\alpha^* = -\alpha}$

$$\left[\alpha\frac{\partial}{\partial x}, x\right] = -i\hbar \quad \text{より}$$

$\boxed{\alpha = -i\hbar}$ $\quad \therefore \hat{p} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$

(c) $V(x)$ は実関数、よって

$$\langle \Psi_1 | V | \Psi_2 \rangle = \langle V\Psi_1 | \Psi_2 \rangle$$

また $\dfrac{\hat{p}^2}{2m} = -\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{\partial^2}{\partial x^2}$ はエルミート

よって $\hat{H} = \dfrac{\hat{p}^2}{2m} + V(x)$ はエルミート

(d) $$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)\right]\Psi(x) = E\Psi(x)$$

- $\Psi(x)$ について 2階の微分方程式だから
  2個の条件が必要
- しかし E も未知数なので もう1個の条件が必要

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x)|^2 dx = 1 \quad \text{をつける}$$

規格化条件

全部で3個の条件が必要

(e) $\hat{A}$ の固有値を a とすると

$\hat{A}\Psi = a\Psi$ このとき $\langle \Psi | \hat{A}\Psi \rangle = a\langle \Psi | \Psi \rangle$

一方 $\hat{A}$ はエルミートだから $\langle \Psi | \hat{A}\Psi \rangle = \langle A\Psi | \Psi \rangle = a^*\langle \Psi | \Psi \rangle$

よって $\boxed{a = a^*}$ すなわち a は実数

5. (a) $A = \{a_{ij}\}$

$$a_{ij} = a_{ji}^* \iff \underline{A = A^+}$$

$$(u, Av) = \sum_{i=1}^{N} u_i^* \cdot (Av)_i$$

ここで $(Av)_i = \sum_{j=1}^{N} a_{ij} v_j$ より

$$(u, Av) = \sum_{i=1}^{N} u_i^* \cdot \sum_{j=1}^{N} a_{ij} v_j$$

$$= \sum_{i,j=1}^{N} u_i^* a_{ji}^* v_j = \sum_{j=1}^{N} \left(\sum_{i=1}^{N} a_{ji}^* u_i^* \right) v_j$$

$$= \sum_{j=1}^{N} \left(\sum_{i=1}^{N} a_{ji} u_i \right)^* \cdot v_j$$

$$= \sum_{j=1}^{N} (Au)_j^* v_j = (Au, v)$$

(b) $\hat{A} u = \lambda u$

$\therefore \quad (u, \hat{A} u) = (\hat{A} u, u)$: $\hat{A}$ はエルミート

$$\lambda (u, u) = \lambda^* (u, u)$$

$\therefore \boxed{\lambda = \lambda^*}$ よって λ は実数

(付録)

6. $[A, B] = \hbar$ のとき

$$e^{A} e^{B} = e^{A+B+\frac{\hbar}{2}}$$ を示せ.

(a) $f(t) = e^{At} e^{Bt} e^{-(A+B)t}$ とおく

$$\frac{df}{dt} = A e^{At} e^{Bt} e^{-(A+B)t} + e^{At} B e^{Bt} e^{-(A+B)t} + e^{At} e^{Bt} (-A-B) e^{-(A+B)t}$$

ここで $B e^{Bt} = e^{Bt} B$, $A e^{At} = e^{At} A$ に注意すると

$$\boxed{\frac{df}{dt} = e^{At} \left(A e^{Bt} - e^{Bt} A \right) e^{-(A+B)t}}$$ が示される

(b) ここで $A e^{Bt} - e^{Bt} A = [A, e^{Bt}] = [A, \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} B^n t^n]$

$$= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} t^n \underbrace{[A, B^n]}_{= n\hbar B^{n-1}}$$

$$\therefore [A, e^{Bt}] = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\hbar}{n!} t^n \cdot n \cdot B^{n-1} = \sum \frac{\hbar}{(n-1)!} t^n B^{n-1}$$

$$= \hbar t \underbrace{\sum \frac{1}{(n-1)!} (tB)^{n-1}}_{= e^{Bt}} = \hbar t e^{Bt}$$

(c) よって $\frac{df}{dt} = \hbar t e^{At} e^{Bt} e^{-(A+B)t} = \hbar t f(t)$

これはすぐに解けて $\boxed{f(t) = C e^{\frac{1}{2}\hbar t^2}}$ と求まる

$f(0) = 1$ なので $C = 1$ よって

$$f(1) = e^{\frac{\hbar}{2}} = e^{A} e^{B} e^{-(A+B)}$$ で示された.

[NO. 2] (2010年度)

1. (a)

$$\langle A \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \hat{A} \Psi \, dx$$

$$\frac{d\langle A \rangle}{dt} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \hat{A} \Psi \, dx + \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \hat{A} \frac{\partial \Psi}{\partial t} \, dx$$

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} \hat{H} \Psi \quad , \quad \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} = -\frac{1}{i\hbar} \hat{H} \Psi^* \quad \text{より}$$

$$\frac{d\langle A \rangle}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \left[-\hat{H} \Psi^* \hat{A} \Psi + \Psi^* \hat{A} \hat{H} \Psi \right] dx$$

$\hat{H}$ はエルミートであるので

$$\therefore \frac{d\langle A \rangle}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \left[\Psi^* (\hat{A}\hat{H} - \hat{H}\hat{A}) \Psi \right] dx$$

$$= \frac{1}{i\hbar} \langle [\hat{A}, \hat{H}] \rangle \quad //$$

(b) 上式で $A = x$ ととると

$$\frac{d\langle x \rangle}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \langle [x, \hat{H}] \rangle$$

一方 $\boxed{[x, \hat{H}] = \frac{\hbar^2}{m} \frac{\partial}{\partial x}}$ と計算されるので (NO.1)

$$\frac{d\langle x \rangle}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \frac{\hbar^2}{m} \left\langle \frac{\partial}{\partial x} \right\rangle = -\frac{i\hbar}{m} \left\langle \frac{\partial}{\partial x} \right\rangle = \frac{1}{m} \left\langle -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right\rangle$$

$$\therefore \underline{\frac{d\langle x \rangle}{dt} = \frac{1}{m} \langle \hat{p} \rangle} \quad \left(\hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right)$$

$A = \hat{p}$ とすると

$$\frac{d\langle \hat{p} \rangle}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \langle [\hat{p}, \hat{H}] \rangle$$

一方 $[\hat{p}, \hat{H}] = -i\hbar \dfrac{\partial U}{\partial x}$ より (No. 1)

$$\frac{d\langle \hat{p} \rangle}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \left\langle -i\hbar \frac{\partial U}{\partial x} \right\rangle = -\left\langle \frac{\partial U}{\partial x} \right\rangle$$

2. (a) $\Psi(x) = N e^{-\frac{x^2}{2b^2}}$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x) \Psi(x)\, dx = N^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{x^2}{b^2}} dx = N^2 (\pi b^2)^{\frac{1}{2}} = 1$$

$$\therefore \ N = \left(\frac{1}{\pi b^2}\right)^{\frac{1}{4}}$$ (← phaseは決まらない)

(b) $\langle x \rangle = N^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{x^2}{2b^2}}\, x\, e^{-\frac{x^2}{2b^2}} dx = 0$

$$\langle x^2 \rangle = N^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{x^2}{b^2}} x^2\, dx = \frac{N^2}{2} \sqrt{\pi b^6} = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{1}{\pi b^2}} \sqrt{\pi b^6}$$

$$\therefore \ \langle x^2 \rangle = \frac{1}{2} b^2$$

(c) $\langle \hat{p} \rangle = N^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{x^2}{2b^2}} \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} e^{-\frac{x^2}{2b^2}}\right) dx = 0$

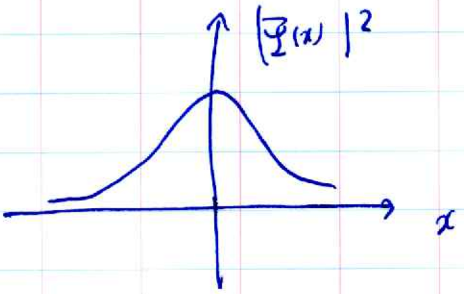
(d) $\langle \hat{p}^2 \rangle = N^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{x^2}{2b^2}} \left(-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} e^{-\frac{x^2}{2b^2}}\right) dx$

$$= -\hbar^2 N^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{x^2}{2b^2}} \left[-\frac{1}{b^2} e^{-\frac{x^2}{2b^2}} + \frac{x^2}{b^4} e^{-\frac{x^2}{2b^2}} \right] dx$$

$$= -\hbar^2 \frac{1}{\sqrt{\pi b^2}} \cdot \left[-\frac{1}{b^2} \sqrt{\pi b^2} + \frac{1}{b^4} \frac{1}{2} \sqrt{\pi b^6} \right] = \frac{\hbar^2}{2b^2}$$

(c) $\Delta x = \sqrt{\frac{b^2}{2}}$, $\Delta p = \sqrt{\frac{\hbar^2}{2b^2}}$ $\quad \therefore \underline{\Delta x \cdot \Delta p = \frac{\hbar}{2}}$

(d)



原点で最大

3. (a)

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x) \right) \Psi(x,t)$$

$\Psi(x,t) \equiv T(t)\, u(x)$ を代入

$$i\hbar \frac{dT}{dt} \cdot u(x) = T(t) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u(x)}{dx^2} + U(x)\, u(x) \right)$$

$$\therefore \quad \frac{i\hbar}{T(t)} \frac{dT}{dt} = \frac{1}{u(x)} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u(x)}{dx^2} + U(x)\, u(x) \right)$$

(b)

$$\frac{i\hbar}{T(t)} \frac{dT(t)}{dt} = E \quad \text{より} \quad \underline{T(t) = T_0 e^{-\frac{i}{\hbar} E t}}$$

一方 $u(x)$ については

$$\underline{-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u(x)}{dx^2} + U(x)\, u(x) = E\, u(x)} \quad \text{となる.}$$

4. (a)

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + U(x) \right) u(x) = E\, u(x)$$

$x \to -x$ とすると $U(x) = U(-x)$ より

$$\underline{\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + U(x) \right) u(-x) = E\, u(-x)}$$

より 両方程式で同じ固有値になるので
$u(x)$ と $u(-x)$ は比例する.

よって $\underline{u(x) = c\,u(-x)}$

(b) $u(-x) = c\,u(x)$ なので

$$u(x) = c\,u(-x) = c^2 u(x)$$

$$\therefore c^2 = 1 \qquad \boxed{c = \pm 1}$$

5. (a) 無限の壁なので ここには粒子は存在しない

よって $\boxed{u(\pm a) = 0}$

(b)

$|x| < a$ より

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2u(x)}{dx^2} = E\,u(x), \quad \underline{\underline{E > 0}}$$

$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$ と定義すると

$$\underline{\frac{d^2u(x)}{dx^2} + k^2 u(x) = 0}$$

この一般解は

$$\underline{u(x) = A\sin kx + B\cos kx}$$ となる

$u(\pm a) = 0$ より

$$\begin{cases} A\sin ka + B\cos ka = 0 \\ -A\sin ka + B\cos ka = 0 \end{cases}$$

よって $\begin{cases} A = 0 & \text{or} \\ B = 0 \end{cases}$

(i) $A=0$ のとき ($B\neq 0$)

$\underline{\cos ka = 0}$ より $\boxed{ka = \frac{\pi}{2} + n\pi}$ $n=0,\pm1,\pm2,\cdots$

より $\underline{u_n(x) = B\cos k_n x}$

$\underline{k_n = \left(n+\frac{1}{2}\right)\frac{\pi}{a}}$

(ii) $B=0$ のとき ($A\neq 0$)

$\underline{\sin ka = 0}$ より $\boxed{ka = n\pi}$ $n=0,\pm1,\pm2,\cdots$

より $\underline{u_n(x) = A\sin k_n x}$

$\underline{k_n = n\frac{\pi}{a}}$ (但し, $n\neq 0$)

$n=0$ だと波動関数がゼロになる

存在確率: $\int_{-a}^{a} |u_n(x)|^2 dx = 1$ より

$$B^2\int_{-a}^{a} \cos^2 k_n x \, dx = |B|^2\int_{-a}^{a} \frac{1}{2}(1+\cos 2k_n x)dx$$

ここで, $\int_{-a}^{a} \cos 2k_n x \, dx = \frac{1}{2k_n}\left[\sin 2k_n x\right]_{-a}^{a}$

$$= \frac{1}{k_n}\sin(2n+1)\pi = 0$$

より $\boxed{B = \frac{1}{\sqrt{a}}}$ 同様に $\boxed{A = \frac{1}{\sqrt{a}}}$

まとめると

対称解のとき

$$k_n = \frac{\pi}{a}\left(n+\frac{1}{2}\right)$$

$$u_n(x) = \frac{1}{\sqrt{a}} \cos k_n x$$

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\left(n+\frac{1}{2}\right)^2 \pi^2}{a^2}$$

反対称解

$$k_n = \frac{\pi}{a} n$$

$$u_n(x) = \frac{1}{\sqrt{a}} \sin k_n x$$

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{n^2 \pi^2}{a^2}$$

(c) 基底状態は $k_n = \left(n+\frac{1}{2}\right)\frac{\pi}{a}$ で $n=0$ のとき

$$k_0 = \frac{\pi}{2a}, \quad u_0(x) = \frac{1}{\sqrt{a}} \cos k_0 x$$

(i) $$\langle x \rangle = \frac{1}{a} \int_{-a}^{a} x \cos^2 k_0 x \, dx = 0$$

(ii) $$\langle x^2 \rangle = \frac{1}{a} \int_{-a}^{a} x^2 \, \frac{1}{2}\left(1 + \cos 2k_0 x\right) dx$$

$$= \frac{1}{2a} \left[\frac{2}{3} a^3 + \int_{-a}^{a} x^2 \cos 2k_0 x \, dx \right]$$

ここで $\int_{-a}^{a} x^2 \cos \frac{\pi}{a} x \, dx = -\left(\frac{a}{\pi}\right)^2 4a$ より

$$\langle x^2 \rangle = \left(\frac{1}{3} - \frac{2}{\pi^2}\right) a^2$$

(iii) $$\langle \hat{p} \rangle = 0$$

(iv) $$\langle \hat{p}^2 \rangle = \frac{1}{a} \int_{-a}^{a} \cos k_0 x \; \hat{p}^2 \cos k_0 x \, dx$$

$$\langle \hat{p}^2 \rangle = \frac{1}{a}(-\hbar^2)(-k_0^2)\int_{-a}^{a} \cos^2 k_0 x \, dx$$

$$= \frac{\hbar^2}{a}\left(\frac{\pi}{2a}\right)^2 \cdot a = \underline{\frac{\hbar^2\pi^2}{4a^2}}$$

よって 不確定性関係は

$$\sqrt{\langle x^2\rangle\langle \hat{p}^2\rangle} = \sqrt{\left(\frac{1}{3}-\frac{2}{\pi^2}\right)\frac{\pi^2}{4}\hbar^2} = \frac{\hbar}{2}\times 1.14 \ \underline{\geqq \frac{\hbar}{2}}$$

(d) $u_n = \frac{1}{\sqrt{a}}\sin k_n x$, $\left(k_n = \frac{n\pi}{a}\right)$ のときを示す

$$\int_{-a}^{a} u_n^*(x)\, u_m(x)\, dx = \frac{1}{a}\int_{-a}^{a} \sin k_n x \sin k_m x \, dx$$

$$= \frac{1}{a}\frac{1}{2}\int_{-a}^{a}\left[-\cos(k_n+k_m)x + \cos(k_n-k_m)x\right] dx$$

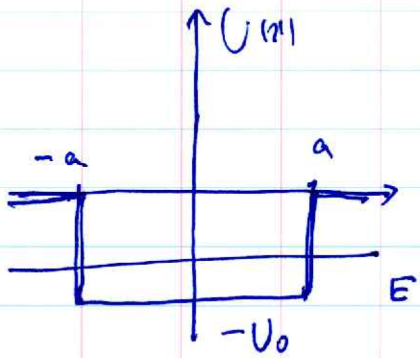
ここで $k_n = k_m$ $(n=m)$ のとき

$$\int_{-a}^{a} u_n^*(x)\, u_n(x)\, dx = \frac{1}{2a}\int_{-a}^{a} dx = 1$$

$k_n \neq k_m$ のとき 常にゼロ。 よって

$$\underline{\int_{-a}^{a} u_n^*(x)\, u_m(x)\, dx = \delta_{nm}} \quad \text{が示された}$$

6.



(a) $x<a$ の時：

$$\frac{d^2u(x)}{dx^2}+\frac{2mE}{\hbar^2}u(x)=0$$

$E<0$ より

$k=\sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}}$ として

$$\frac{d^2u(x)}{dx^2}+k^2u(x)=0$$ となる

この一般解は $\underline{u(x)=Ae^{kx}+Be^{-kx}}$

$u(-\infty)=0$ より $\boxed{u(x)=Ae^{kx}}$

(b) $x>a$ の時：

同様にして $\boxed{u(x)=De^{-kx}}$

(c) $-a<x<a$ の時：

$$\frac{d^2u(x)}{dx^2}+\frac{2m}{\hbar^2}(U_0+E)u(x)=0$$

$\kappa=\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(U_0+E)}$ として

一般解は $\underline{u(x)=F_1\cos\kappa x+F_2\sin\kappa x}$

[$u(x)$, $u'(x)$ の接続]

$x=-a$ ： $\begin{cases} Ae^{-ka}=F_1\cos\kappa a+F_2\sin\kappa a \\ kAe^{-ka}=\kappa(F_1\sin\kappa a+F_2\cos\kappa a) \end{cases}$

$x=a$ ： $\begin{cases} De^{-ka}=F_1\cos\kappa a+F_2\sin\kappa a \\ -kDe^{-ka}=\kappa(-F_1\sin\kappa a+F_2\cos\kappa a) \end{cases}$

整理すると

$$\begin{cases} Ae^{-ka} = F_1 \cos \kappa a - F_2 \sin \kappa a \\ \frac{k}{\kappa} e^{-ka} = F_1 \sin \kappa a + F_2 \cos \kappa a \\ D e^{-ka} = F_1 \cos \kappa a + F_2 \sin \kappa a \\ -\frac{k}{\kappa} e^{-ka} = -F_1 \sin \kappa a + F_2 \cos \kappa a \end{cases}$$

よって

$$\begin{cases} (A+D) e^{-ka} = 2F_1 \cos \kappa a \\ \frac{k}{\kappa}(A+D) e^{-ka} = 2F_1 \sin \kappa a \end{cases}$$

辺々割って

$$\boxed{\frac{\kappa}{k} = \cot \kappa a}$$

同様にして

$$\begin{cases} (A-D) e^{-ka} = -F_2 \sin \kappa a \\ \frac{k}{\kappa}(A-D) e^{-ka} = F_2 \cos \kappa a \end{cases}$$

$$\therefore \boxed{\frac{\kappa}{k} = -\tan \kappa a}$$

$\left(\begin{array}{l} \kappa = \beta \\ k = \alpha \end{array} \right.$ に対応している

(d)

(1)

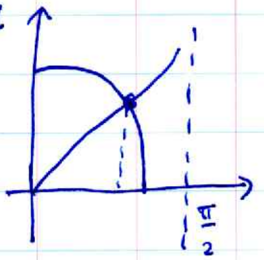
$$\begin{cases} p = \beta a = \sqrt{\frac{2m(U_0 + E)a^2}{\hbar^2}} \\ q = \alpha a = \sqrt{\frac{-2mEa^2}{\hbar^2}} \end{cases}$$

より

$$\boxed{p^2 + q^2 = \frac{2mU_0 a^2}{\hbar^2}}$$

(2) $\dfrac{2mU_0a^2}{\hbar^2} = 1$ とすると

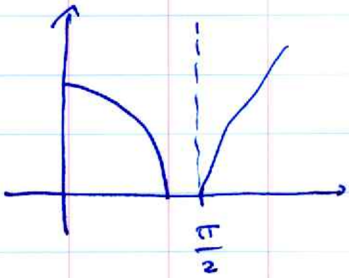
(i) $p^2+q^2=1$, $q=p\tan p$



$\boxed{\begin{matrix} p=0.739 \\ q=0.674 \end{matrix}}$

(電卓で解いた)

(ii) $p^2+q^2=1$ $q=-p\cot p$



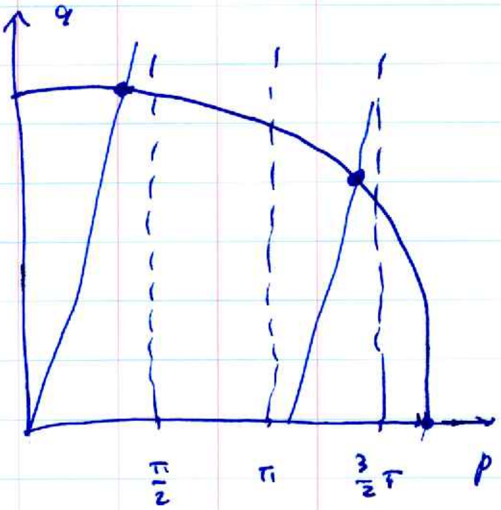
解なし

(3) $U_0=60$ MeV, $mc^2=940$ MeV , $a=3$ fm

$$\therefore \frac{2mU_0a^2}{\hbar^2} = \frac{2mc^2U_0a^2}{(\hbar c)^2} = \frac{2\times 940\times 60\times 3\times 3 \ \mathrm{MeV}^2\mathrm{fm}^2}{(197)^2(\mathrm{MeV})^2(\mathrm{fm})^2}$$

$$\therefore \frac{2mU_0a^2}{\hbar^2} = 26.16$$

(a) 奇状態 : $\begin{cases} p^2+q^2=26.16 \\ p\tan p = q \end{cases}$

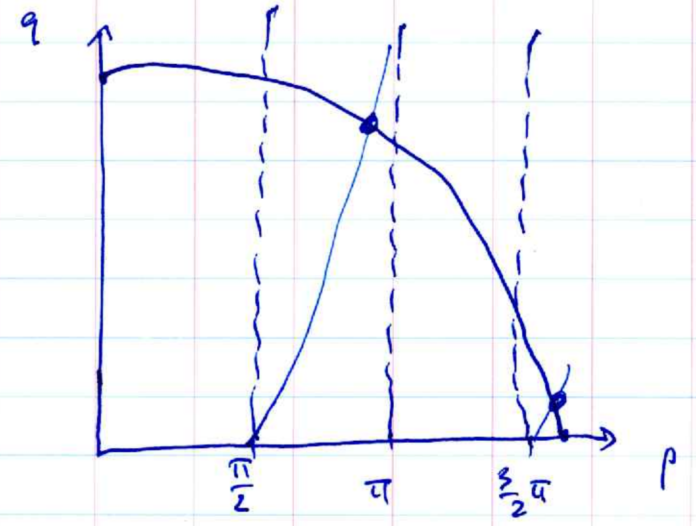


(i) $p=1.31$
$q=4.94$ $E=-56$ MeV

(ii) $p=3.86$
$q=3.36$ $E=-25.9$ MeV

(b) 反対称 :

$$\begin{cases} q = -p\cot p \\ p^2 + q^2 = 26.16 \end{cases}$$



(i) $\begin{cases} p = 2.61 \\ q = 4.40 \end{cases}$

$$\underline{E = -44.4 \quad \text{MeV}}$$

(ii) $\begin{cases} p = 4.96 \\ q = 1.26 \end{cases}$

$$\underline{E = -3.64 \quad \text{MeV}}$$

【NO. 3】　(2010年度)　①

1. (a) $\sigma^2 = \sigma_x^2 + \sigma_y^2 + \sigma_z^2 = 3$

よって $[\sigma_x\ \sigma^2] = 0$ 他も同じ

(b) $\sigma^2 u = 3u$, $\sigma^2 v = 3v$

$\sigma_z u = u$, $\sigma_z v = -v$

よって $u = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$, $v = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ は

σ^2, σ_z の同時固有関数となっている

(c) $\psi = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$ とおると $\underline{\sigma^2 \psi = 3\psi}$

$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$ だから $\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$

$\therefore \begin{pmatrix} \lambda & -1 \\ -1 & \lambda \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = 0$ $\therefore \boxed{\lambda = \pm 1}$

(i) $\lambda = 1$ のとき $\lambda a - b = 0$ $\therefore \underline{a = b}$

$\underline{\psi = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}}$ (たとえば)

(ii) $\lambda = -1$ のとき

$\lambda a - b = 0$ $\therefore \underline{a = -b}$

$\underline{\psi = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}}$

2. (a) $\begin{cases} \hat{A}\phi_n = a_n \phi_n \\ \hat{A}\phi_m = a_m \phi_m \end{cases}$

ここで $\langle \phi_m | \hat{A} | \phi_n \rangle = a_n \langle \phi_m | \phi_n \rangle$

$\hat{A}$はエルミートだから

$\langle \phi_m | \hat{A}\phi_n \rangle = \langle \hat{A}\phi_m | \phi_n \rangle = a_m \langle \phi_m | \phi_n \rangle$

よって $(a_n - a_m)\langle \phi_m | \phi_n \rangle = 0$

$a_n \neq a_m$ のとき $\underline{\langle \phi_m | \phi_n \rangle = 0}$

$n = m$ のときは 規格化より

$\underline{\langle \phi_n | \phi_n \rangle = 1}$

これより $\underline{\langle \phi_n | \phi_m \rangle = \delta_{nm}}$

(b)

$\int |\psi(x)|^2 dx = 1$ より

$\int \sum_n c_n^* \phi_n^+ \sum_m c_m \phi_m \, dx = 1$

$\therefore \sum_{n,m} c_n^* c_m \underbrace{\int \phi_n^+ \phi_m \, dx}_{\delta_{nm}} = 1$

よって $\boxed{\sum_{n=1} |c_n|^2 = 1}$

(c) $\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A}$ 、$\hat{A}$の固有関数をϕ, 固有値をaとする

$\underline{\hat{A}\phi = a\phi}$ 左から $\hat{B}$ をかけると

$\hat{B}\hat{A}\phi = a\hat{B}\phi = \hat{A}\hat{B}\phi$

$\therefore \underline{\hat{A}(\hat{B}\phi) = a(\hat{B}\phi)}$

これは $\hat{A}$ の固有値方程式になっていて

固有関数は $(\hat{B}\phi)$ 固有値は aである。

これは $\hat{B}\phi$ が ϕ に比例することを意味している。

よって $\underline{\hat{B}\phi = b\phi}$ となる.

これは $\hat{B}$ の固有関数も ϕ である事を示している.

(d)

$$u_n = \sum_{n'=1}^{N} U_{nn'} v_{n'}$$

$$\therefore \langle u_m | u_n \rangle = \sum_{n',n''} U^*_{mn'} \underbrace{\langle v_{n'} | v_{n''} \rangle}_{= \delta_{n'n''}} U_{nn''}$$

$$= \sum_{n'} U^*_{mn'} U_{nn'} = \sum_{n'} U_{nn'} (U^\dagger)_{n'm}$$

$$= (UU^\dagger)_{nm} = \delta_{nm}$$

$$\therefore \underline{UU^\dagger = 1}$$

3. (a) $\hat{P}\psi(x) = \psi(-x)$ 　 $\underline{\hat{P}\psi_a(x) = a\psi_a(x)}$ とする (固有値方程式)

よって $\underline{\hat{P}^2\psi_a(x) = a^2\psi_a(x)}$

一方 $\hat{P}^2\psi_a(x) = \hat{P}\psi_a(-x) = \psi_a(x)$

これより $\underline{a^2 = 1}$ 　 $\therefore \boxed{a = \pm 1}$

(b)
$$\begin{cases} a = 1 \text{ のとき} & \psi_a(x) = \psi_a(-x) \quad \text{偶関数} \\ a = 1 & \psi_a(x) = -\psi_a(-x) \quad \text{奇関数} \end{cases}$$

(c) $\hat{P}H(x)\hat{P}^{-1} = H(-x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \underbrace{U(-x)}_{= U(x)} = H(x)$

よって $\underline{\hat{P}H = H\hat{P}}$

(d) $\hat{P}H = H\hat{P}$ ここで $\underline{H\psi_a = E_a\psi_a}$ とする.

左から $\hat{P}$ をかけて $\hat{P}H\psi_a = E_a\hat{P}\psi_a = H\hat{P}\psi_a$

よって $\underline{H(\hat{P}\psi_a) = E_a(\hat{P}\psi_a)}$

これより $(\hat{P}\psi_a)$ は H の固有関数になる.

$\therefore \underline{\hat{P}\psi_a = k\psi_a}$

この式は ψ_a が $\hat{P}$ の固有関数であることを示している.

これより ψ_a は偶関数か奇関数かのどちらかになり,
<u>それ以外ではないことは明らか.</u>

4.

$\hat{P}u(x) = u(x)$ より $u(x)$ は偶関数 $\therefore u(x) = u(-x)$

よって
$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} u^*(x)\, x\, u(x)\, dx = 0$$

同様に $\langle \hat{p} \rangle = 0$
(運動量もパリティ)

(b) $H = \dfrac{\hat{p}^2}{2m} + \alpha x^2$

$E_0 = \langle H \rangle = \dfrac{1}{2m}\langle \hat{p}^2 \rangle + \alpha\langle x^2 \rangle$

$\langle x \rangle = \langle \hat{p} \rangle = 0$ より $\Delta p = \sqrt{\langle p^2 \rangle}$, $\Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle}$

よって
$$E_0 = \frac{1}{2m}\langle p^2 \rangle + \alpha\langle x^2 \rangle = \frac{1}{2m}(\Delta p)^2 + \alpha(\Delta x)^2 \geqq 2\sqrt{\frac{\alpha}{2m}(\Delta p)^2(\Delta x)^2}$$

不確定性関係より $\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$ だから

$E_0 \geq 2\sqrt{\dfrac{\alpha}{2m}}\,\Delta p \cdot \Delta x \geq \hbar\sqrt{\dfrac{\alpha}{2m}}$, 最小値は $\underline{E_0 = \hbar\sqrt{\dfrac{\alpha}{2m}}}$

5. (a) $F_{nm} = \int \Psi_n^*(\mathbf{r},t)\ \hat{F}\ \Psi_m(\mathbf{r},t)\, d^3r \qquad \left(\frac{\partial F}{\partial t} = 0 とする\right)$

より

$$\frac{dF_{nm}}{dt} = \int \frac{\partial \Psi_n^*}{\partial t} \hat{F}\, \Psi_m\, d^3r + \int \Psi_n^* \hat{F} \frac{\partial \Psi_m}{\partial t}\, d^3r$$

Schrödinger 方程式 から
$$\left\{\begin{aligned} \frac{\partial \Psi_n^*}{\partial t} &= \frac{i}{\hbar} E_n \Psi_n^* \\ \frac{\partial \Psi_m}{\partial t} &= -\frac{i}{\hbar} E_m \Psi_m \end{aligned}\right.$$

よって

$$\frac{dF_{nm}}{dt} = \frac{i}{\hbar}\,(E_n - E_m) \int \Psi_n^* \hat{F}\, \Psi_m\, d^3r$$

$$\therefore\ \boxed{\frac{dF_{nm}}{dt} = \frac{i}{\hbar}\,(E_n - E_m)\, F_{nm}}$$

(b) 右辺 $= \frac{i}{\hbar}\,(E_n - E_m)\, F_{nm} = \frac{i}{\hbar} \langle \Psi_n | E_n \hat{F} - \hat{F} E_m | \Psi_m \rangle$

$$= \frac{i}{\hbar} \langle \Psi_n | H\hat{F} - \hat{F} H | \Psi_m \rangle$$

$$\therefore\ \boxed{\frac{dF_{nm}}{dt} = \frac{i}{\hbar}\left([H, \hat{F}]\right)_{nm}}$$

(c) $\hat{F} = \mathbf{r}\cdot\hat{\mathbf{p}}$ とすると

$$[H, \hat{F}] = \left[\frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2M} + U(\mathbf{r}),\ \mathbf{r}\cdot\hat{\mathbf{p}}\right] = \frac{1}{2M}[\hat{\mathbf{p}}^2, \mathbf{r}\cdot\hat{\mathbf{p}}] + [U(\mathbf{r}), \mathbf{r}\cdot\hat{\mathbf{p}}]$$

$$= \frac{1}{2M}\left[\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2,\ x\hat{p}_x + y\hat{p}_y + z\hat{p}_z\right] + \mathbf{r}\,[U(\mathbf{r}), \hat{\mathbf{p}}]$$

ここで $\left\{\begin{aligned} &[p_x^2, x] = -2i\hbar\, p_x \\ &[U(\mathbf{r}), \hat{\mathbf{p}}] = i\hbar \nabla U \end{aligned}\right.$ 等を用いて

$$[H, \mathbf{r}\cdot\hat{\mathbf{p}}] = \frac{1}{2M}(-2i\hbar\,\hat{\mathbf{p}}^2) + i\hbar\,\mathbf{r}\cdot\nabla U = i\hbar\left[-\frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{M} + \mathbf{r}\cdot\nabla U\right]$$

(d) $n=m$ のとき $\langle n|\,[H,\,\mathbf{r}\cdot\mathbf{p}]\,|n\rangle = 0$

よって $\boxed{\langle n|\,\frac{1}{m}\mathbf{p}^2\,|n\rangle = \langle n|\,\mathbf{r}\cdot\nabla U\,|n\rangle}$

これを Virial 定理という。

6.

(a) $E<0$ より $E=-|E|$ とおいて

$$\frac{d^2u}{dx^2} - \frac{2m}{\hbar^2}|E|\,u = 0$$

$x<0$ の時 $k^2 = \frac{2m}{\hbar^2}|E|$ とおいて

$$u(x) = Ae^{kx} + Be^{-kx}$$

$u(-\infty)=0$ より $B=0$ $\therefore \boxed{u(x) = Ae^{kx}}$

(b) $x>0$ の時, 同様にして

$$\boxed{u(x) = Ce^{-kx}}$$

$x=0$ で連続なので

$$\boxed{A=C}$$

(c)
$$\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2u}{dx^2}\,dx - U_0\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon}\delta(x)\,u(x)\,dx = E\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon}u(x)\,dx$$

$\varepsilon\to 0$ のとき $\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon}u(x)\,dx = 0$ よって

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{du}{dx}\right]_{-\varepsilon}^{+\varepsilon} - U_0\,u(0) = 0$$ よって

$$\frac{\hbar^2}{2m}\cdot 2kA - U_0A = 0$$

これより $k = \frac{mU_0}{\hbar^2} = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}|E|}$

$$\therefore \boxed{E = -\frac{mU_0^2}{2\hbar^2}}$$

【NO. 4 】 (2010年度) ①

1. (a) $\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \right) u(x) = E\, u(x)$

$$\left(-\frac{1}{\left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)}\frac{d^2}{dx^2} + \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)x^2 \right) u(x) = \frac{2E}{\hbar\omega}\, u(x)$$

よって $\xi \equiv \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\,x$, $\lambda = \frac{2E}{\hbar\omega}$ とおくと

$$\boxed{\frac{d^2 u(\xi)}{d\xi^2} + (\lambda - \xi^2)\, u(\xi) = 0}$$ となる。

(b) $\xi \to \infty$ のとき

$$\frac{d^2 u(\xi)}{d\xi^2} - \xi^2 \simeq 0$$

$u(\xi) = e^{-\frac{1}{2}\xi^2}$ とおいてみると

$u'(\xi) = -\xi e^{-\frac{1}{2}\xi^2}$, $u''(\xi) = (\xi^2 - 1)\, e^{-\frac{1}{2}\xi^2}$

$\simeq \xi^2 e^{-\frac{1}{2}\xi^2}$ だから

$u(\xi) = e^{-\frac{1}{2}\xi^2}$ は

$\underline{u''(\xi) - \xi^2 u(\xi) = 0}$ をみたしている。

(c) $u(\xi) = f(\xi)\, e^{-\frac{1}{2}\xi^2}$ とおくと

$u'(\xi) = f'(\xi)\, e^{-\frac{1}{2}\xi^2} - \xi f(\xi)\, e^{-\frac{1}{2}\xi^2}$

$u''(\xi) = \left(f''(\xi) - 2f'(\xi)\xi - f(\xi) + f(\xi)\xi^2 \right) e^{-\frac{1}{2}\xi^2}$ だから

$$\boxed{f''(\xi) - 2\xi f'(\xi) + (\lambda - 1) f(\xi) = 0}$$ となる。

(d)
$$\begin{cases} f(\xi) = \xi^s(a_0 + a_1\xi^2 + \cdots + a_n\xi^{2n} + \cdots) \\ f'(\xi) = s\,a_0\xi^{s-1} + a_1(s+2)\xi^{s+1} + \cdots + a_n(2n+s)\xi^{2n+s-1} + \cdots \end{cases}$$

$$f''(\xi) = a_0 s(s-1)\xi^{s-2} + a_1(s+1)(s+2)\xi^s + \cdots + a_n(2n+s)(2n+s-1)\xi^{2n+s-2} + \cdots$$

ここで $-2\xi f'(\xi) = -2a_0 s\xi^s - a_1(s+2)\xi^{s+2} - \cdots - 2a_n(2n+s)\xi^{2n+s} + \cdots$

$$(\lambda-1)f(\xi) = (\lambda-1)a_0\xi^s + (\lambda-1)a_1\xi^{s+2} + \cdots + a_n(\lambda-1)\xi^{2n+s} + \cdots$$

よって ξ^{s-2} の項は0に : $\underline{s(s-1)=0}$ $\boxed{s=0}$ か $\boxed{s=1}$

ξ^{2n+s} の項 :

$$\boxed{a_{n+1}(2n+2+s)(2n+1+s) = (4n+2s+1-\lambda)a_n}$$

(e) $n \gg 1$ のとき $\xi \to \infty$ に対応している。

よって $n\,a_{n+1} \approx a_n$

この解は $\boxed{a_n \approx \dfrac{1}{n!}}$

これより $\xi \to \infty$ では

$$f(\xi) = \xi^s \sum a_n \xi^n \approx \xi^s \sum \frac{1}{n!}(\xi^2)^n \approx \underline{\xi^s e^{\xi^2}}$$ となる。

ところが $u(\xi) = f(\xi)e^{-\frac{1}{2}\xi^2}$ なので

$\xi \to \infty$ で $u(\xi) = \xi^s e^{\frac{1}{2}\xi^2} \to \infty$ となり

境界条件 $u(\infty)=0$ と矛盾する。

(f) これは

$$(2n+2+s)(2n+1+s)\,a_{n+1} = (4n+2s+1-\lambda)\,a_n$$

が常に成り立っていることから生じている。よって、どこかで

$\underline{a_n=0}$ となるようにする。よって

$$\boxed{4n+2s+1-\lambda=0}$$ とすればよい。

$\lambda = \dfrac{2E}{\hbar\omega}$ より $\underline{E = \dfrac{1}{2}\hbar\omega\,(4n+2s+1)}$ となる

$$\begin{cases} s=0 \text{ のとき} & E=\dfrac{1}{2}\hbar\omega\,(4n+1) \quad (n=0,1,2,\cdots) \\ s=1 \text{ のとき} & E=\dfrac{1}{2}\hbar\omega\,(4n+3) \quad (n=0,1,2,\cdots) \end{cases}$$

この2つをまとめると

$$\boxed{E_n = \hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right), \quad n=0,1,2,\cdots}$$

と得る。

2. (a) $\dfrac{d^2 f(\xi)}{d\xi^2} - 2\xi\dfrac{df(\xi)}{d\xi} + (\lambda-1)f(\xi) = 0$

$\lambda = \dfrac{2E}{\hbar\omega} = 2n+1$ より $f(\xi)\equiv H_n(\xi)$ として

$$\boxed{\frac{d^2 H_n(\xi)}{d\xi^2} - 2\xi\frac{dH_n(\xi)}{d\xi} + 2n\,H_n(\xi) = 0}$$

(b) $e^{-x^2+2\xi x} = \displaystyle\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}H_n(\xi)\,x^n$ で $H_n(\xi)$ を定義する。

左辺は $e^{-(x-\xi)^2+\xi^2}$ だから

$$H_n(\xi) = e^{\xi^2}\left[\frac{d^n}{dx^n} e^{-(x-\xi)^2}\right]_{x=0}$$

$$= e^{\xi^2} (-)^n \left[\frac{d^n}{d\xi^n} e^{-(x-\xi)^2}\right]_{x=0}$$

$$= (-)^n e^{\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2}$$

$$\therefore \boxed{H_n(\xi) = (-)^n e^{\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2}}$$

(c)

$$e^{-x^2+2\xi x} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} H_n(\xi) x^n$$ の両辺をξで微分

$$2x e^{-x^2+2\xi x} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} H_n'(\xi) x^n$$

一方 $$2x e^{-x^2+2\xi x} = 2x \sum_{n=0}^{n} \frac{1}{n!} H_n(\xi) x^n$$

$$= 2 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} H_n(\xi) x^{n+1}$$ ($n+1 \to n$ と置きかえる)

$$= 2 \sum \underbrace{\frac{1}{(n-1)!} H_{n-1}(\xi)}_{= \frac{n}{n!} H_{n-1}(\xi)} x^n$$

よって

$$\boxed{H_n'(\xi) = 2n H_{n-1}(\xi)}$$

⑤

また

$$\frac{dH_n(\xi)}{d\xi} = (-)^n 2\xi\, e^{\xi^2}\left(\frac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2}\right) + (-)^n e^{\xi^2}\left(\frac{d^{n+1}}{d\xi^{n+1}} e^{-\xi^2}\right)$$

$$\boxed{H_n(\xi) = (-)^n e^{\xi^2}\frac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2}}$$

$$\therefore\ \underline{\frac{dH_n(\xi)}{d\xi} = 2\xi\, H_n(\xi) - H_{n+1}(\xi)}$$

一方 $\dfrac{dH_n(\xi)}{d\xi} = 2n\, H_{n-1}(\xi)$ より

$$2n\, H_{n-1}(\xi) = 2\xi\, H_n(\xi) - H_{n+1}(\xi)$$

$$\therefore\ \boxed{H_{n+1}(\xi) - 2\xi\, H_n(\xi) + 2n\, H_{n-1}(\xi) = 0}$$

[微分方程式のチェック] $\dfrac{d^2H_n}{d\xi^2} - 2\xi\dfrac{dH_n}{d\xi} + 2n\, H_n = 0$ のチェック?

$$\boxed{\frac{dH_n}{d\xi} = 2nH_{n-1}}$$

$$\frac{d^2H_n}{d\xi^2} = 2n\frac{dH_{n-1}}{d\xi} = 2n\,(2n-2)\,H_{n-2}$$

よって

$$\frac{d^2H_n}{d\xi^2} - 2\xi\frac{dH_n}{d\xi} + 2nH_n = 2n(2n-2)H_{n-2} - 2\xi\cdot 2n\,H_{n-1} + 2nH_n$$

$$= \underline{2n\left[H_n - 2\xi\, H_{n-1} + (2n-2)\,H_{n-2}\right]} = 0$$ となる。

確かに漸化式をみたしている

(ここ：$n \to n+1$ とすると $H_{n+1} - 2\xi H_n + 2nH_{n-1} = 0$ となっている)

3. (a) $H_0 = 1, \quad H_1 = 2\xi, \quad H_2 = 2\xi H_1 - 2H_0 = 4\xi^2 - 2$

$H_3 = 2\xi H_2 - 2\times 2 H_1 = 8\xi^3 - 12\xi$

(b)
$$e^{-x^2+2\xi x - y^2 - 2\xi y - \xi^2} = \sum_{n,m=0}^{\infty} \frac{1}{n!m!} x^n y^m H_n(\xi) H_m(\xi) e^{-\xi^2}$$

従って これを ξ で積分すると

$$\text{左辺} = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2+2\xi x - y^2 - 2\xi y - \xi^2} d\xi = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-(\xi-(x+y))^2 + 2xy} d\xi$$
$$= \sqrt{\pi}\, e^{2xy} = \sqrt{\pi} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} x^n y^n \cdot 2^n$$

$$\text{右辺} = \sum_{n,m=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \frac{1}{m!} x^n y^m \int_{-\infty}^{\infty} H_n(\xi) H_m(\xi) e^{-\xi^2} d\xi$$

よって

(a) $n \neq m$ のとき $\quad \underline{\int_{-\infty}^{\infty} H_n(\xi) H_m(\xi) e^{-\xi^2} d\xi = 0}$

(b) $n = m$ のとき $\quad \underline{\frac{1}{n!} \int_{-\infty}^{\infty} H_n(\xi) H_n(\xi) e^{-\xi^2} d\xi = \sqrt{\pi}\, 2^n}$

まとめると

$$\boxed{\int_{-\infty}^{\infty} H_n(\xi) H_m(\xi) e^{-\xi^2} d\xi = \sqrt{\pi}\, 2^n n!\, \delta_{nm}}$$ となる.

4. $x \to \pm\infty$, $u(\pm\infty) = 0$ が原因.

この境界条件が波動関数を閉じこめ
数学的に量子数 n がとびとびになり, た

5.

(a)

$[\hat{p}, x] = -i\hbar$ より

$$[a, a^\dagger] = \left[\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x + \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\hat{p}, \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x - \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\hat{p}\right]$$

$$= \frac{1}{2\hbar}(-i)(i\hbar) + \frac{i}{2\hbar}(-i\hbar) = \underline{1}$$

(b)

$$a^\dagger a = \left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x - \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\hat{p}\right)\left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x + \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\hat{p}\right)$$

$$= \frac{m\omega^2}{2\hbar}x^2 + \frac{1}{2m\hbar\omega}\hat{p}^2 + \frac{i}{2\hbar}[x, \hat{p}]$$

$$\therefore \underline{\frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 = \hbar\omega\left(a^\dagger a + \frac{1}{2}\right) = \hat{H}}$$

(c)

$\hat{N} = a^\dagger a$ より

$$\begin{cases} [\hat{N}, a] = [a^\dagger a, a] = [a^\dagger, a]a = -a \\ [\hat{N}, a^\dagger] = [a^\dagger a, a^\dagger] = a^\dagger[a, a^\dagger] = a^\dagger \end{cases}$$

(d)

$\hat{N}\phi_n = n\phi_n$ とすると $[\hat{N}, a]\phi_n = -a\phi_n$

$$\therefore \underline{\hat{N}a\phi_n = (n-1)a\phi_n}$$

よって $a\phi_n$ も $\hat{N}$ の固有関数であり、固有値は $(n-1)$

よって

$$\boxed{a\phi_n = k\phi_{n-1}}$$

(kはある定数)

同様にして

$$\boxed{a^\dagger\phi_n = k'\phi_{n+1}}$$

(f)

$$\hat{H} = \hbar\omega\left(a^\dagger a + \frac{1}{2}\right) = \hbar\omega\left(\hat{N} + \frac{1}{2}\right)$$

よって

$$\hat{H}\phi_n = E_n\phi_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)\phi_n$$

$$E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right), \quad n = 0, 1, 2, \cdots$$

(g) a^+, a で解いたとき

$$n = \langle \phi_n | \hat{N} | \phi_n \rangle$$ が有限であることを仮定している。

$\underline{\langle \phi_n | \phi_n \rangle = 1}$ の条件が整数を除いた解を選んだことになっている。

(注：調和振動子は有限な整数 n の解しかないので)

6. (a) $a^+ \phi_n = \alpha \phi_{n+1}$

$$\langle \phi_n | a a^+ | \phi_n \rangle = \langle a^+ \phi_n | a^+ \phi_n \rangle = \alpha^2 \langle \phi_{n+1} | \phi_{n+1} \rangle = \alpha^2$$

しかし 左辺 $= \langle \phi_n | a a^+ | \phi_n \rangle = \langle \phi_n | 1 + \underbrace{a^+ a}_{\hat{N}} | \phi_n \rangle = 1 + n$

$$\therefore \ \underline{\alpha = \sqrt{1+n}}$$

(b) 同様にして $\beta = \sqrt{n}$

$$\left(\underset{\beta^2}{\underset{\shortparallel}{\langle a\phi_n | a\phi_n \rangle}} = \langle \phi_n | a^+ a | \phi_n \rangle = n \right)$$

$$\begin{cases} a^+ \phi_n = \sqrt{n+1}\ \phi_{n+1} \\ a \phi_n = \sqrt{n}\ \phi_{n-1} \end{cases}$$

[NO. 5] 2010年度

①

1. $$\nabla = e_r \frac{\partial}{\partial r} + e_\theta \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial \theta} + e_\varphi \frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial \theta}$$

$$\nabla\cdot\nabla = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + e_\theta \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(e_r \frac{\partial}{\partial r}\right) + \underbrace{e_\theta \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(e_\theta \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}\right)}_{} \quad \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}$$

$$+ \underbrace{e_\theta \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(e_\varphi \frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)}_{0''} + \underbrace{e_\varphi \frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\left(e_r \frac{\partial}{\partial r}\right)}_{} = \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}$$

$$+ \underbrace{e_\varphi \frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\left(e_\theta \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}\right)}_{= \frac{\cos\theta}{r\sin\theta}\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}} + \underbrace{e_\varphi \frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\left(e_\varphi \frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)}_{= \frac{1}{(r\sin\theta)^2}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}}$$

ここで
$$\begin{cases} \frac{\partial e_r}{\partial r} = 0, & \frac{\partial e_\theta}{\partial r} = 0, \quad \frac{\partial e_\varphi}{\partial r} = 0 \quad \frac{\partial e_r}{\partial \theta} = e_\theta \\ \frac{\partial e_r}{\partial\varphi} = \sin\theta\, e_\varphi, & \frac{\partial e_\theta}{\partial\theta} = -e_r, \quad \frac{\partial e_\theta}{\partial\varphi} = \cos\theta\, e_\varphi \\ \frac{\partial e_\varphi}{\partial\theta} = -\sin\theta\, e_r, & \frac{\partial e_\varphi}{\partial\varphi} = -\cos\theta\, e_\theta \end{cases}$$ より计算した。

$$\nabla\cdot\nabla = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \frac{1}{r^2}\frac{\cos\theta}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}$$

$$= \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2}\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]$$

2. (a)
$$-\frac{\hbar^2}{2M}\left\{\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2}\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]\right\}\psi(r)$$
$$+ V(r)\psi(r) = E\psi(r)$$

(b) $\psi(r) = u(r)Y(\theta,\varphi)$ とすると

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2M}\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{du(r)}{dr}\right) + V(r)u(r)\right\}Y(\theta,\varphi)$$
$$-\left\{\frac{\hbar^2}{2Mr^2}\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]Y(\theta,\varphi)\right\}u(r)$$
$$= E\,u(r)\,Y(\theta,\varphi)$$

②

①と $u(r)Y(\theta,\varphi)$ で割算し

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M}\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{du(r)}{dr}\right)+V(r)u(r)\right]\frac{1}{u(r)}$$

$$\underbrace{-\frac{\hbar^2}{2Mr^2}\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial Y(\theta,\varphi)}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2 Y(\theta,\varphi)}{\partial\varphi^2}\right]\frac{1}{Y(\theta,\varphi)}}_{-\frac{\hbar^2}{2Mr^2}\lambda \text{ とおく}}=E$$

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial Y(\theta,\varphi)}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2 Y(\theta,\varphi)}{\partial\varphi^2}=\lambda Y(\theta,\varphi)$$

$u(r)$ に対しては

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{du(r)}{dr}\right)-\frac{\hbar^2\lambda}{2Mr^2}u(r)+V(r)u(r)=Eu(r)$$

(c)

$Y(\theta,\varphi)=f(\theta)g(\varphi)$ とおくと

$$\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{df(\theta)}{d\theta}\right)\right]g(\varphi)+\frac{1}{\sin^2\theta}\left(\frac{d^2g(\varphi)}{d\varphi^2}\right)f(\theta)$$

$$=\lambda f(\theta)g(\varphi)$$

これは変数分離型。よって

$$\boxed{\frac{d^2g(\varphi)}{d\varphi^2}=-\nu g(\varphi)}$$ とおくと

$$\boxed{\frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{df(\theta)}{d\theta}\right)-\frac{\nu}{\sin^2\theta}f(\theta)=\lambda f(\theta)}$$

となる。

3. $$\left(\frac{d^2}{d\varphi^2}+\nu\right)g(\varphi)=0 \qquad (\nu>0)$$

この一般解は $g(\varphi)=Ae^{i\sqrt{\nu}\varphi}+Be^{-i\sqrt{\nu}\varphi}$ である。

ここで $g(\varphi)$ が $\hat{L}_z=-i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}$ の固有関数であるとすると

$$\boxed{g(\varphi)=A\,e^{i\sqrt{\nu}\varphi}}$$ となる。

$g(\varphi)=g(\varphi+2\pi)$ より

$$2\pi\sqrt{\nu}=2m\pi$$

$$\therefore \boxed{\nu=m^2} \qquad (m\text{ は整数})$$

4. $$\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d}{d\theta}\right)-\frac{m^2}{\sin^2\theta}\right]f(\theta)=\lambda f(\theta)$$

ここで $\zeta=\cos\theta$ とおくと $\frac{d}{d\theta}=\frac{d}{d\zeta}\frac{d\zeta}{d\theta}=-\sin\theta\frac{d}{d\zeta}$

よって

$$\sin\theta\frac{d}{d\theta}=-\sin^2\theta\frac{d}{d\zeta}=-(1-\zeta^2)\frac{d}{d\zeta}$$

よって $\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d}{d\theta}\right)=\sin\theta\frac{d}{d\zeta}(1-\zeta^2)\frac{d}{d\zeta}$ となる。

これより $f(\theta)=P(\zeta)$ とおくと

$$\boxed{\left[\frac{d}{d\zeta}(1-\zeta^2)\frac{d}{d\zeta}-\frac{m^2}{1-\zeta^2}-\lambda\right]P(\zeta)=0}$$ となる。

(b) $P(\zeta)=\sum_{n=0}^{\infty} a_n \zeta^n$, $P'(\zeta)=\sum n a_n \zeta^{n-1}$

$$(1-\zeta^2)P'(\zeta)=\sum\left(n a_n \zeta^{n-1}-n a_n \zeta^{n+1}\right)$$

$$\frac{d}{d\zeta}(1-\zeta^2)P'(\zeta)=\sum\left[n(n-1)a_n\zeta^{n-2}-n(n+1)a_n\zeta^n\right]$$

$m=0$を考えているので微分方程式は

$$\sum_n\left[n(n-1)a_n\zeta^{n-2}-n(n+1)a_n\zeta^n\right]-\lambda\sum a_n\zeta^n=0$$

nは変数. よって第1項は書き直すと

$$\sum_{n=2} n(n-1)a_n\zeta^{n-2}=\sum_{n=0}(n+2)(n+1)a_{n+2}\zeta^n$$ となる.

これより

$$\sum_n\left[(n+2)(n+1)a_{n+2}\zeta^n-\left(n(n+1)+\lambda\right)a_n\zeta^n\right]=0$$

これはζに対して恒等式なので ζ^nの係数は全て0, よって

$$\boxed{(n+2)(n+1)a_{n+2}=\left[n(n+1)+\lambda\right]a_n}$$ となる.

今 $\zeta\to1$ のときを考えるので これは $n\gg1$ に対応している.
この時

$$\boxed{a_{n+2}\cong a_n}$$ となる

よって

$$P(\zeta)=\sum a_n\zeta^n=a_0\sum\zeta^n\to\infty\quad(\zeta\to1)$$

となり. $P(1)$ は発散する. このことは境界条件と矛盾. よって

$$\boxed{n(n+1)+\lambda=0}$$ である必要がある

$\therefore\ \lambda=-n(n+1)$, $(n=0,1,2,\cdots)$

5. (a) $$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2M}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \underbrace{\frac{\hat{L}^2}{2Mr^2}}_{} + V(r)$$

これは遠心力に対応，斥力

(b) $\hat{L}^2$ は (θ, φ) のみの関数，よって

$$\underline{[\hat{H}, \hat{L}^2] = \frac{1}{2Mr^2}[\hat{L}^2, \hat{L}^2] = 0}$$

(c) $\hat{L}^2$ と $\hat{H}$ は同時固有関数をもっている。

$$\hat{H}\psi = E\psi \quad \text{としたとき}$$

$$\hat{L}^2\psi = \lambda\psi \quad \text{でもある。}$$

実際， $\psi(r) = R(r)\,Y(\theta,\varphi)$ としたとき

$$\underline{\hat{L}^2 Y(\theta,\varphi) = \lambda\, Y(\theta,\varphi)} \quad \text{であった}$$

6. (a) $$f_\ell(x,y,z) = (ax+by+cz)^\ell$$

$$\Delta f_\ell(x,y,z) = \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)(ax+by+cz)^\ell$$

$$= \ell(\ell+1)(a^2+b^2+c^2)(ax+by+cz)^{\ell-2} = 0$$

よって $\boxed{a^2+b^2+c^2=0}$ であればよい。

(b) $$f_\ell(x,y,z) = \sum_{\alpha+\beta+\gamma=\ell} A_\ell^{\alpha\beta\gamma}\, x^\alpha y^\beta z^\gamma$$

極座標は $\begin{cases} x = r\sin\theta\cos\varphi \\ y = r\sin\theta\sin\varphi \\ z = r\cos\theta \end{cases}$ となるから

$$f_l(x,y,z) = \sum A_l^{\alpha\beta\gamma} r^{\alpha+\beta+\gamma} (\sin\theta\cos\varphi)^\alpha (\sin\theta\sin\varphi)^\beta (\cos\theta)^\gamma$$

$$= C_0 r^l Y_l(\theta,\varphi)$$ と書ける。

但し

$$Y_l(\theta,\varphi) \equiv \sum A_l^{\alpha\beta\gamma} (\sin\theta)^{\alpha+\beta} (\cos\theta)^\gamma (\cos\varphi)^\alpha (\sin\varphi)^\beta$$

である。

ここで

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2 \frac{\partial}{\partial r}\right) - \frac{\hat{\mathbb{L}}^2}{\hbar^2 r^2}$$ と書けるので

よって

$$\Delta f_l(x,y,z) = \left[\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) - \frac{\hat{\mathbb{L}}^2}{\hbar^2 r^2}\right] C_0 r^l Y_l(\theta,\varphi) = 0$$

ここで

$$\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r} r^l\right) = \frac{1}{r^2} l(l+1) r^l$$ より

$$\frac{C_0}{r^2} l(l+1) r^l Y_l(\theta,\varphi) = \frac{\hat{\mathbb{L}}^2}{\hbar^2}\frac{1}{r^2} C_0 r^l Y_l(\theta,\varphi)$$

$$\therefore \boxed{\hat{\mathbb{L}}^2 Y_l(\theta,\varphi) = \hbar^2 l(l+1) Y_l(\theta,\varphi)}$$

よって、これは $\hat{\mathbb{L}}^2$ の固有値が $\hbar^2 l(l+1)$

固有関数が $Y_l(\theta,\varphi)$

である事を示している。

1. (a) $L_x = yp_z - zp_y$ より $[L_x, x] = [yp_z - zp_y, x] = 0$

$[L_x, y] = [yp_z - zp_y, y] = -z[p_y, y] = i\hbar z$

$[L_x, p_x] = 0$, $[L_x, p_y] = [yp_z - zp_y, p_y] = [y, p_y]p_z = i\hbar p_z$

(b) $[L_x, L_y] = [yp_z - zp_y, zp_x - xp_z] = y[p_z, z]p_x + [z, p_z]p_y x$

$= -i\hbar yp_x + i\hbar xp_y = i\hbar L_z$ 他の交換関係も同じ

(c) $[\mathbb{L}^2, L_x] = [L_y^2 + L_z^2, L_x] = L_y[L_y, L_x] + [L_y, L_x]L_y + L_z[L_z, L_x] + [L_z, L_x]L_z$

$= -i\hbar L_yL_z - i\hbar L_zL_y + i\hbar L_zL_y + i L_yL_z = 0$

他も同じ

2.

(a) $L_z = -i\hbar\dfrac{\partial}{\partial\varphi}$ より

$$L_z Y_{lm}(\theta\varphi) = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi} f_l(\theta)\cdot\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\varphi}$$

$$= \underline{\hbar m\, Y_{lm}(\theta, \varphi)}$$

(b) $\mathbb{L}^2 - L_z^2 = L_x^2 + L_y^2 \geq 0$ (L_x, L_y はエルミート演算子だから)

$$\therefore\ \hbar^2 l(l+1) - \hbar^2 m^2 \geq 0$$

$$\underline{-\sqrt{l(l+1)} \leq m \leq \sqrt{l(l+1)}}$$

(c) $L_+ = L_x + iL_y$

$[L_z, L_+] = [L_z, L_x + iL_y] = i\hbar L_y + i(-i\hbar)L_x$

$\underline{= \hbar L_+}$

同様にして $\underline{[L_z, L_-] = -\hbar L_-}$

(d) $L_z L_+ - L_+ L_z = \hbar L_+$ より

$$(L_z L_+ - L_+ L_z)\, Y_{lm}(\theta,\varphi) = \hbar L_+ Y_{lm}(\theta,\varphi)$$

$$\therefore\ \underline{L_z L_+ Y_{lm}(\theta,\varphi) = \hbar(m+1) L_+ Y_{lm}(\theta,\varphi)}$$

これは $(L_+ Y_{lm}(\theta,\varphi))$ が L_z の固有関数であることを示す。

また、その固有値は $(m+1)\hbar$ である。よって

$L_+ Y_{lm}(\theta,\varphi)$ は $Y_{l,m+1}(\theta,\varphi)$ に比例している。

$$\underline{L_+ Y_{lm}(\theta,\varphi) = k\, Y_{l,m+1}(\theta,\varphi)} \qquad k\text{は定数}$$

同様に $\underline{L_- Y_{lm}(\theta,\varphi) = k'\, Y_{l,m-1}(\theta,\varphi)}$

3. (a)

$$\mathbb{L}^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2 = (L_x - iL_y)(L_x + iL_y) + L_z^2 - i(L_x L_y - L_y L_x)$$

$$= L_- L_+ + \hbar L_z + L_z^2$$

$$\therefore\ \underline{L_- L_+ = \mathbb{L}^2 - L_z^2 - \hbar L_z}$$

ここで $\underline{L_+ Y_{ll}(\theta,\varphi) = 0}$ $(-l \leq m \leq l$ だから$)$

$$\therefore\ L_- L_+ Y_{ll}(\theta\varphi) = 0 = (\mathbb{L}^2 - L_z^2 - \hbar L_z) Y_{ll}(\theta,\varphi)$$

$$\therefore\ \underline{\mathbb{L}^2 Y_{ll}(\theta,\varphi) = (L_z^2 + \hbar L_z) Y_{ll}(\theta,\varphi) = \hbar^2 l(l+1) Y_{ll}(\theta,\varphi)}$$

(b) $L_+ Y_{\ell\ell}(\theta,\varphi) = 0$ より $L_+ = \hbar e^{i\varphi}\left(\frac{\partial}{\partial\theta} + i\cot\theta\,\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)$ を代入

$$\therefore\ \hbar e^{i\varphi}\left(\frac{\partial}{\partial\theta} + i\cot\theta\,\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) Y_{\ell,\ell}(\theta,\varphi) = 0$$

$Y_{\ell\ell}(\theta\varphi) = f_\ell(\theta)\,\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\,e^{i\ell\varphi}$ を代入する,

$$\underline{\left(\frac{d}{d\theta} - \ell\cot\theta\right) f_\ell(\theta) = 0}$$ となる.

よって
$$\frac{d f_\ell(\theta)}{d\theta} = \ell\,\frac{\cos\theta}{\sin\theta}\,f_\ell(\theta)$$

$$\therefore\ \frac{d f_\ell(\theta)}{f_\ell(\theta)} = \ell\,\frac{\cos\theta}{\sin\theta} = \ell\,\frac{d(\sin\theta)}{\sin\theta}$$

$$\therefore\ \ln f_\ell(\theta) = \ln(\sin\theta)^\ell + C$$

$$\boxed{f_\ell(\theta) = f_0(\sin\theta)^\ell}$$ が得られる

(c) $f_\ell = N_\ell \sin^\ell\theta$ の規格化は

$$N_\ell^2 \int_0^\pi \sin^{2\ell}\theta\ \sin\theta\, d\theta = 1$$

$t = \cos\theta$ とおくと $N_\ell^2 \int_{-1}^1 (1-t^2)^\ell\, dt = 1$

ここで $F_\ell = \int_{-1}^1 (1-t^2)^\ell\, dt$ とおく. このとき

$$F_1 = \int_{-1}^1 (1-t^2)\, dt = \frac{4}{3}$$

F_ℓ を変形して

$$F_\ell = \int_{-1}^{1} (1-t^2)(1-t^2)^{\ell-1} dt = F_{\ell-1} - \int_{-1}^{1} t^2 (1-t^2)^{\ell-1} dt$$

ところが

$$\int_{-1}^{1} t^2 (1-t^2)^{\ell-1} dt = t\left[-\frac{1}{2\ell}(1-t^2)^\ell\right]_{-1}^{1} - \left(\frac{-1}{2\ell}\right)\int_{-1}^{1}(1-t^2)^\ell dt$$

$$= \frac{1}{2\ell} F_\ell$$ よって

$$F_\ell = F_{\ell-1} - \frac{1}{2\ell} F_\ell \quad \therefore \quad \boxed{F_\ell = \frac{2\ell}{2\ell+1} F_{\ell-1}}$$ となる

$F_1 = \frac{4}{3}$ だったから

$$\boxed{F_\ell = \frac{2\,(2\ell)!!}{(2\ell+1)!!}}$$ となる。但し

$$\begin{cases} (2\ell)!! = 2 \times 4 \times \cdots \times 2\ell \\ (2\ell+1)!! = 1 \times 3 \times \cdots \times (2\ell+1) \end{cases}$$

これより

$$N_\ell = \frac{1}{\sqrt{F_\ell}}$$ となる

4. (a)

$$\mathbb{L}^2 = L_+L_- + L_z^2 - \hbar L_z$$

$$\therefore \langle Y_{\ell m} | \mathbb{L}^2 | Y_{\ell m} \rangle = \hbar^2 \ell(\ell+1)$$

$$= \langle Y_{\ell m} | L_+L_- + L_z^2 - \hbar L_z | Y_{\ell m} \rangle = \langle Y_{\ell m} | L_+L_- | Y_{\ell m} \rangle + \hbar^2 m^2 - \hbar^2 m$$

一方

$$\langle Y_{\ell m} | L_+L_- | Y_{\ell m} \rangle = \langle Y_{\ell m} | L_+ | Y_{\ell, m-1} \rangle \langle Y_{\ell, m-1} | L_- | Y_{\ell m} \rangle$$

$$= \langle Y_{\ell m} | L_+ | Y_{\ell, m-1} \rangle \left(\langle Y_{\ell m} | L_+ | Y_{\ell, m-1} \rangle\right)^+$$

$$= \left| \langle Y_{\ell m} | L_+ | Y_{\ell, m-1} \rangle \right|^2$$

よって $\quad \left| \langle Y_{lm} | L_+ | Y_{l,m-1} \rangle \right|^2 = \hbar^2 \left[l(l+1) - m(m-1) \right]$

となる.

これより

$$\boxed{\langle Y_{lm} | L_+ | Y_{l,m-1} \rangle = \hbar \sqrt{(l-m+1)(l+m)}}$$

同様にして

$$\boxed{\langle Y_{l,m-1} | L_- | Y_{l,m} \rangle = \hbar \sqrt{(l-m+1)(l+m)}}$$

と求まる.

(c) $\quad C_- = \hbar \sqrt{(l-m+1)(l+m)}$

5. (a) $\quad x' = x - y\theta, \quad y' = y + x\theta, \quad z' = z \quad$ よって

$$\Psi(x-y\theta,\ y+x\theta,\ z) = \Psi(x,y,z) + \frac{\partial \Psi}{\partial x}(-y\theta) + \frac{\partial \Psi}{\partial y}(x\theta) + \cdots$$

$$= \left[1 - \left(y\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial y} \right)\theta + \cdots \right] \Psi(x,y,z)$$

よって $\quad \underline{U_\theta = 1 - \theta\left(y\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial y} \right)}$

(b) $\quad U_\theta = 1 + \frac{i}{\hbar}\theta L_z$

(c) $\quad \lim_{n\to\infty} \left(1 + \frac{\theta}{n}\right)^n = e^\theta \quad$ より $\quad \underline{U(\theta) = e^{\frac{i}{\hbar}\theta L_z}}$

(d) $\quad U^\dagger(\theta) = e^{-\frac{i}{\hbar}\theta L_z} \quad$ より

$$\underline{U^\dagger(\theta) U(\theta) = 1}$$

【NO.7】

(2010年度) ①

1. (a)

$$R(r) = \frac{1}{r}u(r) \quad , \quad \frac{dR}{dr} = \frac{1}{r}\frac{du}{dr} - \frac{u}{r^2}$$

よって

$$\frac{d}{dr}\left(r^2 \frac{dR}{dr}\right) = \frac{d}{dr}\left(r\frac{du}{dr} - u(r)\right) = \frac{du}{dr} + r\frac{d^2u}{dr^2} - \frac{du}{dr} = r\frac{d^2u}{dr^2}$$

これより

$$\underline{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2u(r)}{dr^2} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}u(r) + V(r)u(r) = E\,u(r)}$$

となる。

(b) S-波 $l=0$ である。

遠心力ポテンシャルは常に斥力 $\left(\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} > 0\right)$

よって $l=0$ だと、この斥力がないので $l=0$ が最も安定になる。

(※) $\underline{E_l \equiv \langle \chi_l | H_l | \chi_l \rangle}$ ，但し $\underline{H_l = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + V(r)}$

(但し $H_l\chi_l = E\chi_l$) とした時，$\underline{E_{l+1} > E_l}$ を示す。

$$\underline{H_{l+1} = H_l + \frac{\hbar^2(l+1)}{2mr^2}} \quad \text{より}$$

$$E_{l+1} = \langle \chi_{l+1} | H_{l+1} |_{l+1} \rangle = \langle \chi_{l+1} | H_l | \chi_{l+1} \rangle + \langle \chi_{l+1} | \frac{\hbar^2(l+1)}{2mr^2} | \chi_{l+1} \rangle$$

ところが χ_{l+1} は H_l の固有関数ではないので

$$\underline{\langle \chi_{l+1} | H_l | \chi_{l+1} \rangle > E_l}$$

よって

$$E_{l+1} \geq E_l + \langle \chi_{l+1} | \frac{\hbar^2(l+1)}{2mr^2} | \chi_{l+1} \rangle > E_l$$

$$\therefore \underline{E_{l+1} > E_l}$$

2. (a) $\dfrac{\mathbf{p}_1^2}{2m_1} + \dfrac{\mathbf{p}_2^2}{2m_2} = \dfrac{1}{2}\left(\dfrac{1}{m_1} + \dfrac{1}{m_2}\right)\mathbf{p}^2 + \dfrac{1}{2M}\mathbf{P}^2$

$(M = m_1 + m_2)$

(b) $m = \dfrac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} = \dfrac{m_1}{1 + \frac{m_1}{m_2}} \simeq m_1 \quad \begin{cases} m_2 = 940 \ \mathrm{MeV}/c^2 \\ m_1 = 0.51 \ 〃 \end{cases}$

(c) $\hat{\mathbf{L}}^2 Y_{lm}(\theta,\varphi) = \hbar^2 l(l+1) Y_{lm}(\theta,\varphi)$

ここで $\psi(r) = \dfrac{1}{r} u(r) Y_{lm}(\theta,\varphi)$ を代入すると

$$\underline{\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} - \frac{Ze^2}{r}\right]u(r) = Eu(r)}$$

(d) $r \to \infty$ のとき $-\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{d^2u(r)}{dr^2} = Eu(r)$

$E < 0$ より $k = \sqrt{-\dfrac{2mE}{\hbar^2}}$ とおく

$$\underline{\frac{d^2u(r)}{dr^2} - k^2u(r) = 0}$$ となる

一般解は $\underline{u(r) = Ae^{-kr} + Be^{kr}}$

$r \to \infty$ で $u(\infty) = 0$ より $\underline{B = 0}$

$$\therefore \boxed{u(r) = Ae^{-kr}}$$

(e) $\rho = 2\sqrt{\dfrac{2m|E|}{\hbar^2}}\, r$, $\epsilon = \sqrt{\dfrac{me^4}{2\hbar^2|E|}}$ とおくと

$$\boxed{\frac{d^2u(\rho)}{d\rho^2} + \left[-\frac{1}{4} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} + \frac{\epsilon Z}{\rho}\right]u(\rho) = 0}$$ となる

3. (a) $$u'' + \left[-\frac{1}{4} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} + \frac{\epsilon Z}{\rho}\right] u = 0$$

$u = e^{-\frac{\rho}{2}} \rho^{l+1} L(\rho)$ を代入する.

$$\begin{cases} u' = -\frac{1}{2} e^{-\frac{\rho}{2}} \rho^{l+1} L(\rho) + (l+1) \rho^{l} e^{-\frac{\rho}{2}} L(\rho) + e^{-\frac{\rho}{2}} \rho^{l+1} L'(\rho) \\ u'' = \frac{1}{4} e^{-\frac{\rho}{2}} \rho^{l+1} L(\rho) - \frac{1}{2}(l+1) e^{-\frac{\rho}{2}} \rho^{l} L(\rho) - \frac{1}{2} e^{-\frac{\rho}{2}} \rho^{l+1} L'(\rho) \end{cases}$$

$$- \frac{1}{2}(l+1) e^{-\frac{\rho}{2}} \rho^{l} L(\rho) + l(l+1) e^{-\frac{\rho}{2}} \rho^{l-1} L(\rho) + (l+1) e^{-\frac{\rho}{2}} L'(\rho)$$

$$- \frac{1}{2} e^{-\frac{\rho}{2}} \rho^{l+1} L'(\rho) + (l+1) e^{-\frac{\rho}{2}} \rho^{l} L'(\rho) + e^{-\frac{\rho}{2}} \rho^{l+1} L''(\rho)$$

よって

$$u'' = \frac{1}{4} u(\rho) - (l+1) e^{-\frac{\rho}{2}} \rho^{l} L(\rho) - e^{-\frac{\rho}{2}} \rho^{l+1} L'(\rho)$$
$$+ 2(l+1) e^{-\frac{\rho}{2}} L(\rho) + l(l+1) e^{-\frac{\rho}{2}} \rho^{l-1} L(\rho) + e^{-\frac{\rho}{2}} \rho^{l+1} L''(\rho)$$

これより u'' を最初の式に代入すると

$$\boxed{\rho L''(\rho) + [2(l+1) - \rho] L'(\rho) + [\epsilon Z - (l+1)] L(\rho) = 0}$$

が求まる.

(b) $$L(\rho) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \rho^n$$ と展開する

このとき $$\begin{cases} L'(\rho) = \sum n a_n \rho^{n-1} \\ L''(\rho) = \sum n(n-1) a_n \rho^{n-2} \end{cases}$$ より

$$\boxed{\sum_n \left[n(n+1) a_{n+1} + 2(l+1)(n+1) a_{n+1} - n a_n + (\epsilon Z - (l+1)) a_n\right] \rho^n = 0}$$

となる

ρ^n の係数は ρ^n … なので

$$\left[\epsilon Z-(l+1)-n\right]a_n+\left[2(n+1)(l+1)+n(n+1)\right]a_{n+1}=0$$

(c) $n\to\infty$ のとき 上の式は $-na_n+n^2a_{n+1}=0$

$$\therefore\ \boxed{a_n\approx\frac{1}{n!}}$$ となる.

(d) このとき $L(\rho)=\sum a_n\rho^n\approx\sum\frac{1}{n!}\rho^n=e^\rho$ となり

$$u(\rho)\sim e^{-\frac{\rho}{2}}\rho^{l+1}e^\rho\sim\rho^{l+1}e^{\frac{\rho}{2}}\to\infty$$
$(\rho\to\infty)$

となり 境界条件と矛盾する. ($u(\infty)=0$)

(e) よって $\boxed{\epsilon Z-(l+1)-n_r=0}$ を満たす n_r が存在する

$$\therefore\ n_r=\epsilon Z-l-1$$

(f) $\epsilon=\dfrac{me^4}{2\hbar^2|E|}$ なので $\boxed{E=-\dfrac{mZ^2e^4}{2\hbar^2n^2}}$ となる

但し $n\equiv n_r+l+1$ とした.

この時 $n=1,2,3,\cdots$ となる

4. $Y_{lm}(\theta,\varphi)$ の m は

$$-l \le m \le l$$ の整数

よって $(2l+1)$ 重の縮退である.

l は $(n-1)$ までとれる

($n_r = n-l-1 \ge 0$ より)

よって

$$\sum_{n=0}^{n-1}(2l+1) = n^2$$

[NO. 8]

(2010年度) ①

1. (a)

$$E_1 = -\frac{me^4}{2\hbar^2} = -\frac{mc^2 e^4}{2(\hbar c)^2} = -\frac{1}{2}\, 0.511 \times \left(\frac{1}{137}\right)^2$$

$$\therefore \underline{E_1 = -13.6\ \mathrm{eV}}$$

(b)

$$\psi_{nlm}(r) = R_{nl}(r)\, Y_{lm}(\theta, \varphi)$$

1s-状態： $n=1,\ l=0,\ m=0$

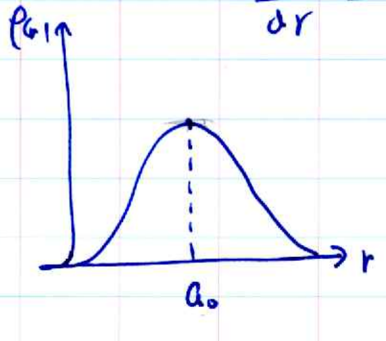
$$R_{1s}(r) = 2\left(\frac{1}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{r}{a_0}}, \quad a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2}$$

存在確率：

$$\rho(r) \equiv |R_{1s}(r)|^2 r^2, \quad \int_0^\infty \rho(r)\, dr = 1$$

$$\therefore \underline{\rho(r) = 4\left(\frac{1}{a_0}\right)^3 r^2 e^{-\frac{2r}{a_0}}}$$

$$\frac{d\rho}{dr} = 4\left(\frac{1}{a_0}\right)^3 \left[-\frac{2}{a_0} r^2 e^{-\frac{2r}{a_0}} + 2r\, e^{-\frac{2r}{a_0}}\right] = 0 \quad より$$



$\underline{r = a_0}$ が最大値をとる

(c) 2p-状態：

$$\psi_{2p}(r) = R_{2p}(r) \times \begin{cases} Y_{11}(\theta\varphi) = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin\theta\, e^{i\varphi} \\ Y_{10}(\theta\varphi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos\theta \\ Y_{1,-1}(\theta\varphi) = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin\theta\, e^{-i\varphi} \end{cases}$$

$$\underline{R_{2p}(r) = \left(\frac{1}{2a_0}\right)^{\frac{3}{2}} \frac{r}{\sqrt{3}\, a_0} e^{-\frac{r}{2a_0}}}$$

②

(d) (i) 1S-状態

$$\langle 1s | \frac{Ze^2}{r} | 1s \rangle = \left(\frac{1}{a_0}\right)^3 4Ze^2 \int_0^\infty e^{-\frac{2r}{a_0}} \frac{r^2}{r} dr = \frac{Ze^2}{a_0} = \frac{mZ^2e^4}{\hbar^2}$$

$$\left(a_0 = \frac{\hbar^2}{Zme^2} \right)$$ これは $|E_1|$ の2倍

(ii) Virial 定理より

$$\left\langle \frac{p^2}{2m} \right\rangle_{1s} = -\frac{1}{2} \left\langle -\frac{Ze^2}{r} \right\rangle_{1s}$$

$$E_{1s} = \left\langle \frac{p^2}{2m} \right\rangle_{1s} - \left\langle \frac{Ze^2}{r} \right\rangle = -\frac{mZ^2e^4}{2\hbar^2}$$ より

$$\therefore \left\langle \frac{p^2}{2m} \right\rangle_{1s} = \frac{mZ^2e^4}{2\hbar^2}$$ である.

(一方 Virial 定理 と上の計算では) ⇒ $\left\langle \frac{p^2}{2m} \right\rangle_{1s} = -\frac{1}{2} \left\langle -\frac{Ze^2}{r} \right\rangle_{1s} = \frac{mZ^2e^4}{2\hbar^2}$ で一致している.

(iii) 2p-状態:

$$\langle 2p | \frac{Ze^2}{r} | 2p \rangle = \left(\frac{1}{2a_0}\right)^3 \frac{1}{3a_0^2} \int_0^\infty r^2 e^{-\frac{r}{a_0}} \left(\frac{Ze^2}{r}\right) r^2 dr$$

$$\times \int \left(\sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos\theta\right)^2 \sin\theta d\theta d\varphi$$

$$\therefore \langle 2p | \frac{Ze^2}{r} | 2p \rangle = \frac{1}{8a_0^3} \frac{1}{3a_0^2} Ze^2 6a_0^4 = \frac{Ze^2}{4a_0} = \frac{mZ^2e^4}{4\hbar^2}$$

(e) $$\langle 2p | r\cos\theta | 1s \rangle = \int \left(\frac{1}{2a_0}\right)^{\frac{3}{2}} \left(\frac{r}{\sqrt{3}a_0}\right) \cdot e^{-\frac{r}{2a_0}} \left(\sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos\theta\right) \cdot (r\cos\theta)$$

$$\times \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \left(\frac{1}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} 2 e^{-\frac{r}{a_0}} r^2 \sin\theta d\theta d\varphi dr$$

角度: $$\int \cos^2\theta \sin\theta d\theta d\varphi = 2\pi \int_{-1}^1 t^2 dt = \frac{4\pi}{3}$$

動径: $$\int_0^\infty r^4 e^{-\frac{3r}{2a_0}} dr = \frac{2^8}{3^4} a_0^5$$

よ, 2

$$\langle 2p|r\cos\theta|1s\rangle = \frac{1}{2\sqrt{2}}\cdot\frac{1}{\sqrt{3}}\,\frac{\sqrt{3}}{4\pi}\,2\cdot\frac{4\pi}{3}\cdot\frac{2^8}{3^4}\cdot a_0^5\,\frac{1}{a_0^3}\,\frac{1}{a_0}$$

$$\therefore\ \langle 2p|r\cos\theta|1s\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\,\frac{2^8}{3^5}\,a_0$$

2. (a) $\Psi_{1s}(r) = N\,e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 r^2}$

規格化: $1 = \int |\Psi_{1s}(r)|^2 d^3r \quad N^2\int e^{-\alpha^2 r^2} d^3r$

$$= N^2\left(\frac{\sqrt{\pi}}{\alpha}\right)^3 \qquad \therefore\ N = \left(\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}\right)^{\frac{3}{2}}$$

(b) (i) $\langle 1s|\frac{p^2}{2m}|1s\rangle = N^2\frac{1}{2m}\int e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 r^2}(-\hbar^2\nabla^2)\,e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 r^2} d^3r$

$$= \frac{N^2}{2m}(4\pi)(-\hbar^2)\int_0^\infty e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 r^2}\left[\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{d}{dr}e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 r^2}\right)\right]r^2dr$$

ここで $\frac{d}{dr}r^2\left(\frac{d}{dr}e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 r^2}\right) = (-\alpha^2)(3r^2-\alpha^2 r^4)e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 r^2}$ より

$$\langle 1s|\frac{p^2}{2m}|1s\rangle = -\frac{\hbar^2}{2m}N^2(4\pi)(-\alpha^2)\int_0^\infty(3r^2-\alpha^2 r^4)e^{-\alpha^2 r^2}dr$$

$$= \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}\right)^3 4\pi\alpha^2\,\frac{3}{8}\,\frac{\sqrt{\pi}}{\alpha^3} = \frac{3}{4}\hbar\omega \qquad \left(\alpha = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\right)$$

(ii) $\langle 1s|V|1s\rangle = N^2\int e^{-\alpha^2 r^2}\left(\frac{1}{2}m\omega^2 r^2\right)d^3r$

$$= N^2\frac{1}{2}m\omega^2\,4\pi\int_0^\infty e^{-\alpha^2 r^2}r^4dr = 2\pi N^2 m\omega^2\frac{3}{8}\sqrt{\frac{\pi}{\alpha^{10}}} = \frac{3}{4}\hbar\omega$$

(c) これより $\langle 1s|V|1s\rangle = \langle 1s|\frac{p^2}{2m}|1s\rangle$ が成立つ.

(注) Virial定理を使うと $2\langle 1s|\frac{p^2}{2m}|1s\rangle = \langle 1s|r\cdot\nabla V|1s\rangle = 2\langle 1s|V|1s\rangle$

より成立つ.

3.

(a) $J^2 = J_x^2 + J_y^2 + J_z^2$　　$[J^2, J_z] = 0$ は明らか

(b) $J = \frac{1}{2}$, $M = \pm\frac{1}{2}$ として

$$\begin{cases} M = \frac{1}{2} & \begin{cases} \langle \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} | J_x - iJ_y | \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \rangle = \hbar \\ \langle \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} | J_x + iJ_y | \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \rangle = 0 \end{cases} \\ M = -\frac{1}{2} & \begin{cases} \langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2} | J_x + iJ_y | \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \rangle = \hbar \\ \langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2} | J_x - iJ_y | \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \rangle = 0 \end{cases} \end{cases}$$

として

$$\begin{cases} \langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2} | J_x | \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \rangle = \frac{1}{2}\hbar \\ \langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2} | J_y | \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \rangle = -\frac{i}{2}\hbar \\ \langle \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} | J_x | \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \rangle = \frac{1}{2}\hbar \\ \langle \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} | J_y | \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \rangle = \frac{i}{2}\hbar \end{cases}$$

一方対角成分は
$$\begin{cases} \langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2} | J_x | \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \rangle = \langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2} | J_y | \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \rangle = 0 \\ \langle \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} | J_x | \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \rangle = \langle \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} | J_y | \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \rangle = 0 \end{cases}$$

これより

$$\begin{cases} J_x = \hbar \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}\sigma_x \\ J_y = \hbar \begin{pmatrix} 0 & -\frac{1}{2}i \\ \frac{1}{2}i & 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}\sigma_y \end{cases}$$ となる

同様に　$J_z = \frac{\hbar}{2}\sigma_z$　も求まる

(c) $J = 1$ のとき

$$\begin{cases} M = 1 & \langle 1, 0 | J_x - iJ_y | 1, 1 \rangle = \sqrt{2}\hbar \\ M = 0 & \langle 1, \pm 1 | J_x \pm iJ_y | 1, 0 \rangle = \sqrt{2}\hbar \\ M = -1 & \langle 1, 0 | J_x + iJ_y | 1, -1 \rangle = \sqrt{2}\hbar \end{cases}$$

また
$$\langle 1, 0 | J_x + iJ_y | 1, 1 \rangle = 0$$
$$\langle 1, 0 | J_x - iJ_y | 1, -1 \rangle = 0$$

また
$$\begin{cases} \langle 1,0 | J_x | 1,1 \rangle = \dfrac{\sqrt{2}}{2}\hbar \\ \langle 1,0 | J_y | 1,1 \rangle = \dfrac{\sqrt{2}}{2} i \hbar \end{cases}$$

$$\begin{cases} \langle 1,0 | J_x | 1,-1 \rangle = \dfrac{\sqrt{2}}{2}\hbar \\ \langle 1,0 | J_x | 1,-1 \rangle = -\dfrac{\sqrt{2}}{2} i \hbar \end{cases}$$
より

$$\begin{cases} J_x = \dfrac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{array}{c} \begin{array}{ccc} m= -1 & 0 & 1 \end{array} \\ \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \end{array} \\ J_y = \dfrac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ +i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix} \\ J_z = \hbar \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \end{cases}$$
と表せる

4. (a) 略

(b) $S^2 = \dfrac{\hbar^2}{4}\sigma^2 = \dfrac{3}{4}\hbar^2$ $\quad S^2 \chi_m = \hbar^2 s(s+1)\chi_m = \dfrac{3}{4}\hbar^2 \chi_m$

よって $\boxed{s = \frac{1}{2}}$

(c) $\begin{cases} S^2 \chi_{\frac{1}{2}} = \frac{3}{4}\hbar^2 \chi_{\frac{1}{2}} \\ S_z \chi_{\frac{1}{2}} = \frac{\hbar}{2}\chi_{\frac{1}{2}} \end{cases}$, $\begin{cases} S^2 \chi_{-\frac{1}{2}} = \frac{3}{4}\hbar^2 \chi_{-\frac{1}{2}} \\ S_z \chi_{-\frac{1}{2}} = -\frac{1}{2}\hbar \chi_{-\frac{1}{2}} \end{cases}$ 固有関数になっている.

(d) $S_x = \dfrac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$ より

$S_x \chi_{\frac{1}{2}} = \dfrac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \dfrac{\hbar}{2}\chi_{-\frac{1}{2}}$ 固有関数でない

同様に $S_x \chi_{-\frac{1}{2}} = \dfrac{\hbar}{2}\chi_{\frac{1}{2}}$

(e)

$\chi = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$ として $S_x \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$ が固有値方程式.

$\therefore \begin{pmatrix} \lambda & -\frac{\hbar}{2} \\ -\frac{\hbar}{2} & \lambda \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = 0 \qquad \therefore \lambda^2 - \left(\frac{\hbar}{2}\right)^2 = 0$

$$\underline{\lambda = \pm\frac{\hbar}{2}}$$

(i) $\lambda = \frac{\hbar}{2}$ のとき $a = b$ $\quad \chi = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$

(ii) $\lambda = -\frac{\hbar}{2}$ のとき $a = -b$ $\quad \chi = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$

(但し $a^2 + b^2 = 1$ とした)

5. (a) $S_x = S_{1x} + S_{2x}$, $S_y = S_{1y} + S_{2y}$, $S_z = S_{1z} + S_{2z}$

$$\therefore \underline{[S_x, S_y] = i\hbar S_{1z} + i\hbar S_{2z} = i\hbar S_z}$$

(b) $\boldsymbol{S}^2 = \boldsymbol{S}_1^2 + \boldsymbol{S}_2^2 + 2\boldsymbol{S}_1 \cdot \boldsymbol{S}_2 = \frac{3}{2}\hbar^2 + 2\boldsymbol{S}_1 \cdot \boldsymbol{S}_2$

(c) $\boldsymbol{S}_1 \cdot \boldsymbol{S}_2 = S_{1x} S_{2x} + S_{1y} S_{2y} + S_{1z} S_{2z}$

ここで
$$\begin{cases} S_{1x} S_{2x} \chi^{(1)}_{\frac{1}{2}} \chi^{(2)}_{\frac{1}{2}} = \frac{\hbar^2}{4} \chi^{(1)}_{-\frac{1}{2}} \chi^{(2)}_{-\frac{1}{2}} \\ S_{1y} S_{2y} \chi^{(1)}_{\frac{1}{2}} \chi^{(2)}_{\frac{1}{2}} = -\frac{\hbar^2}{4} \chi^{(1)}_{-\frac{1}{2}} \chi^{(2)}_{-\frac{1}{2}} \end{cases}$$

より $\boldsymbol{S}_1 \cdot \boldsymbol{S}_2 \chi^{(1)}_{\frac{1}{2}} \chi^{(2)}_{\frac{1}{2}} = \frac{\hbar^2}{4} \chi^{(1)}_{\frac{1}{2}} \chi^{(2)}_{\frac{1}{2}}$ となる.

これより
$$\boldsymbol{S}^2 \chi^{(1)}_{\frac{1}{2}} \chi^{(2)}_{\frac{1}{2}} = \left(\frac{3}{2}\hbar^2 + 2 \cdot \frac{\hbar^2}{4}\right) \chi^{(1)}_{\frac{1}{2}} \chi^{(2)}_{\frac{1}{2}}$$
$$= 2\hbar^2 \chi^{(1)}_{\frac{1}{2}} \chi^{(2)}_{\frac{1}{2}} = \hbar^2 S(S+1) \chi^{(1)}_{\frac{1}{2}} \chi^{(2)}_{\frac{1}{2}}$$

これより $\boxed{S = 1}$

$\chi^{(1)}_{\frac{1}{2}} \chi^{(2)}_{\frac{1}{2}}$ は $\boldsymbol{S}^2$ の固有関数.

また $S_z \chi^{(1)}_{\frac{1}{2}} \chi^{(2)}_{\frac{1}{2}} = \hbar \chi^{(1)}_{\frac{1}{2}} \chi^{(2)}_{\frac{1}{2}}$ より S_z の固有関数.

同様にして

$$\begin{cases} S^2 \chi^{(1)}_{-\frac{1}{2}} \chi^{(2)}_{-\frac{1}{2}} = 2\hbar^2 \chi^{(1)}_{-\frac{1}{2}} \chi^{(2)}_{-\frac{1}{2}} & (S=1) \\ S_z \chi^{(1)}_{-\frac{1}{2}} \chi^{(2)}_{-\frac{1}{2}} = -\hbar \chi^{(1)}_{-\frac{1}{2}} \chi^{(2)}_{-\frac{1}{2}} & (S_z=-1) \end{cases}$$

(d)

$$\begin{cases} S_{1x} S_{2x} \chi^{(1)}_{\frac{1}{2}} \chi^{(2)}_{-\frac{1}{2}} = \frac{\hbar^2}{4} \chi^{(1)}_{-\frac{1}{2}} \chi^{(2)}_{\frac{1}{2}} \\ S_{1y} S_{2y} \chi^{(1)}_{\frac{1}{2}} \chi^{(2)}_{-\frac{1}{2}} = \frac{\hbar^2}{4} \chi^{(1)}_{-\frac{1}{2}} \chi^{(2)}_{\frac{1}{2}} \end{cases}$$

となり打ち消し合わない。

同様にして

$$\begin{cases} S_{1x} S_{2x} \chi^{(1)}_{-\frac{1}{2}} \chi^{(2)}_{\frac{1}{2}} = \frac{\hbar^2}{4} \chi^{(1)}_{\frac{1}{2}} \chi^{(2)}_{-\frac{1}{2}} \\ S_{1y} S_{2y} \chi^{(1)}_{-\frac{1}{2}} \chi^{(2)}_{\frac{1}{2}} = \frac{\hbar^2}{4} \chi^{(1)}_{\frac{1}{2}} \chi^{(2)}_{-\frac{1}{2}} \end{cases}$$

で打ち消し合わない。

よって S^2 の固有関数ではない

(e)

$$\begin{cases} \Psi_{10} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\chi^{(1)}_{\frac{1}{2}} \chi^{(2)}_{-\frac{1}{2}} + \chi^{(1)}_{-\frac{1}{2}} \chi^{(2)}_{\frac{1}{2}} \right] \\ \Psi_{00} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\chi^{(1)}_{\frac{1}{2}} \chi^{(2)}_{-\frac{1}{2}} - \chi^{(1)}_{-\frac{1}{2}} \chi^{(2)}_{\frac{1}{2}} \right] \end{cases}$$

とすると

$$\begin{cases} S^2 \Psi_{10} = 2\hbar^2 \Psi_{10} & (S=1) \\ S_z \Psi_{10} = 0 & (S_z=0) \end{cases}$$

$$\begin{cases} S^2 \Psi_{00} = 0 & (S=0) \\ S_z \Psi_{00} = 0 & (S_z=0) \end{cases}$$

となり、固有関数になっている。

6.

(a) $\begin{cases} \text{対称：} & \Phi_{11},\ \Phi_{1,-1},\ \Phi_{10} \\ \text{反対称：} & \Phi_{00} \end{cases}$

(b) $1 \leftrightarrow 2$ の交換に対して，$S = S_1 + S_2 = S_2 + S_1$ で不変

(c) $[P_{12}, S^2] = 0$ より P_{12} と S^2 は

同時固有関数をもつ．

$\begin{cases} S=1 \text{ のとき} & \Phi_{11},\ \Phi_{1,-1},\ \Phi_{10} \text{ は対称} \\ S=0 & \Phi_{00} \text{ は反対称} \end{cases}$

$\begin{cases} P_{12}\,\Phi_{11} = \Phi_{11} \\ P_{12}\,\Phi_{1,-1} = \Phi_{1,-1} \\ P_{12}\,\Phi_{10} = \Phi_{10} \end{cases}$ 固有値は $\boxed{+1}$

$P_{12}\,\Phi_{00} = -\Phi_{00}$ 固有値は $\boxed{-1}$

1. (a)

$$H_0 \Phi_n^{(0)} = E_n^{(0)} \Phi_n^{(0)} \quad (n=0,1,2,\cdots\infty)$$

Schrödinger 方程式

$$(H_0 + \lambda H')(\Phi_0 + \lambda \Phi_1 + \lambda^2 \Phi_2 + \cdots)$$

$$= (E_0 + \lambda E_1 + \lambda^2 E_2 + \cdots)(\Phi_0 + \lambda \Phi_1 + \lambda^2 \Phi_2 + \cdots)$$

(i) λ の 0次 : (λ^0) $\quad H_0 \Phi_0 = E_0 \Phi_0$ これは非摂動の方程式

(ii) λ の 1次 : (λ^1) $\quad H_0 \Phi_1 + H' \Phi_0 = E_0 \Phi_1 + E_1 \Phi_0$

(iii) λ の 2次 : (λ^2) $\quad H_0 \Phi_2 + H' \Phi_1 = E_0 \Phi_2 + E_1 \Phi_1 + E_2 \Phi_0$

(b) $\Phi_0 \leftrightarrow \Phi_n^{(0)}$ に対応している $n=0$ が基底状態とする.

$$\underline{\Phi_1 = \sum C_n^{(1)} \Phi_n^{(0)}}$$ と展開して $C_n^{(1)}$ を求める.

$$H_0 \Phi_1 + H' \Phi_0 = E_0 \Phi_1 + E_1 \Phi_0$$

$$\therefore \quad H_0 \sum C_n^{(1)} \Phi_n^{(0)} + H' \Phi_0^{(0)} = E_0^{(0)} \sum C_n^{(1)} \Phi_n^{(0)} + E_1 \Phi_0^{(0)}$$

左から $\langle \Phi_0^{(0)} |$ をかけて内積を作ると

$$E_0^{(0)} C_0^{(1)} + \langle \Phi_0^{(0)} | H' | \Phi_0^{(0)} \rangle = E_0^{(0)} C_0^{(1)} + E_1$$

(但し $\langle \Phi_n^{(0)} | \Phi_m^{(0)} \rangle = \delta_{mn}$)

よって $\boxed{E_1 = \langle \Phi_0^{(0)} | H' | \Phi_0^{(0)} \rangle}$ と求まる

次に左から $\langle \Phi_m^{(0)} |$ をかけて内積を作る (但し $m \neq 0$)

$$\therefore \quad E_m^{(0)} \sum C_n^{(1)} \underbrace{\langle \Phi_m^{(0)} | \Phi_n^{(0)} \rangle}_{\delta_{mn}} + \langle \Phi_m^{(0)} | H' | \Phi_0^{(0)} \rangle = E_0^{(0)} C_m^{(1)}$$

よって

$$\boxed{C_m^{(1)} = \frac{\langle \Psi_m^{(0)} | H' | \Psi_0^{(0)} \rangle}{E_0^{(0)} - E_m^{(0)}}}$$

とする。

(c) λ^2 の項は

$$H_0 \Psi_2 + H' \Psi_1 = E_0 \Psi_2 + E_1 \Psi_1 + E_2 \Psi_0$$

ここで $\Psi_2 = \sum_{n \neq 0} C_2^{(2)} \Psi_n^{(0)}$ と展開する

$\Psi_1 = \sum C_n^{(1)} \Psi_n^{(0)}$ は (b) で求めたものを使う。

よって

$$H_0 \sum_{n \neq 0} C_n^{(2)} \Psi_n^{(0)} + H' \sum_{n \neq 0} C_n^{(1)} \Psi_n^{(0)} = E_0^{(0)} \sum_{n \neq 0} C_n^{(2)} \Psi_n^{(0)}$$

$$+ E_1 \sum_{n \neq 0} C_n^{(1)} \Psi_n^{(0)} + E_2 \Psi_0^{(0)}$$

左から $\langle \Psi_0^{(0)} |$ をかけて内積をとると

$$\langle \Psi_0^{(0)} | H' | \sum_{n \neq 0} C_n^{(1)} \Psi_n^{(0)} \rangle = E_2$$

$$\therefore \boxed{E_2 = \sum_{n \neq 0} \frac{1}{E_0^{(0)} - E_n^{(0)}} \left| \langle \Psi_0^{(0)} | H' | \Psi_n^{(0)} \rangle \right|^2}$$

と求まる。

2. (a) $H' = \beta x$

1次の摂動エネルギーは

$$E_1 = \langle 0 | H' | 0 \rangle = \langle 0 | \beta x | 0 \rangle = 0$$

$$\left(\text{但し} \quad \langle 0 | x | 0 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \left| \Psi_0^{(0)}(x) \right|^2 x \, dx = 0 \right)$$

一方 $H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 + \beta x$

$= \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\left(x + \frac{\beta}{m\omega^2}\right)^2 - \frac{\beta^2}{2m\omega^2}$

ここで $x' = x + \frac{\beta}{m\omega^2}$ とおくと

$\underline{H = \frac{1}{2m}p'^2 + \frac{1}{2}m\omega^2 x'^2 - \frac{\beta^2}{2m\omega^2}}$ となるので

このエネルギー固有値は

$\underline{E_n = \left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega - \frac{\beta^2}{2m\omega^2}}$ と求まる

よって β の1次の項はないので正しく一致している

(b) $H' = \beta x^2$ の時

$E_1 = \langle 0|\beta x^2|0\rangle = \beta\int_{-\infty}^{\infty}|\psi_0(x)|^2 x^2\,dx$

$= \beta\left(\frac{\alpha^2}{\pi}\right)^{\frac{1}{2}}\int_{-\infty}^{\infty}x^2 e^{-\alpha^2x^2}dx = \beta\left(\frac{\alpha^2}{\pi}\right)^{\frac{1}{2}}\frac{1}{2}\left(\frac{\pi}{\alpha^6}\right)^{\frac{1}{2}}$

$= \frac{\beta}{2\alpha^2}$ ここで $\alpha = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$ を入れると

$\boxed{E_1 = \frac{\beta\hbar}{2m\omega}}$ となる。

一方 $H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2 + \beta x^2$

$= \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\left(1+\frac{2\beta}{m\omega^2}\right)x^2 = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega'^2x^2$

但し $\omega' = \omega\sqrt{1+\frac{2\beta}{m\omega^2}}$ より $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega = \frac{1}{2}\hbar\omega\left(1+\frac{2\beta}{m\omega^2}\right)^{\frac{1}{2}}$

これより $E_0 \simeq \frac{1}{2}\hbar\omega + \frac{\beta\hbar}{2m\omega} + \cdots$ より $\underline{E_0^{(1)} = \frac{\beta\hbar}{2m\omega}}$ で一致する

(c) $$E_2 = -\sum_{n\neq 0} \frac{1}{E_n^{(0)} - E_0^{(0)}} \left| \langle 0 | H' | n \rangle \right|^2$$

ここで $x = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}}\,(a + a^+)$, $\langle 0 | a | 1 \rangle = 1$ を使って

$$E_2 = -\frac{1}{\hbar\omega}\beta^2 \left(\frac{1}{2}\sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}} \right)^2 = \underline{-\frac{\beta^2}{2m\omega^2}}$$ となる.

厳密解 $E_2 = -\frac{\beta^2}{2m\omega^2}$ と一致している.

3.

(a) $\Psi(x) = N e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 x^2}$, $N = \left(\frac{\alpha^2}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}}$

$$E^{(1)} = \langle \Psi | H' | \Psi \rangle = V_0 |\Psi(0)|^2 = V_0 \left(\frac{\alpha^2}{\pi}\right)^{\frac{1}{2}}$$

(b) $$E^{(1)} = V_0 |\Psi(a)|^2 = V_0 \left(\frac{\alpha^2}{\pi}\right)^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 a^2}$$

$\underline{a \to \infty \text{ で } E^{(1)} \to 0}$

4. $\Psi = \sum_{k=1}^{s} C_k \phi_0^{(k)}$ 但し $H_0 \phi_0^{(k)} = E_0^{(0)} \phi_0^{(k)}$, $(k = 1, 2, \cdots s)$

$\underline{E_0^{(k)} = E_0^{(0)}}$ となっている. 縮退

Schrödinger 方程式は

$$(H_0 + H')\Psi = E\Psi$$

$$(H_0 + H') \sum_{k=1}^{s} C_k \phi_0^{(k)} = E \sum_{k=1}^{s} C_k \phi_0^{(k)}$$

左から $\langle \phi_0^{(\ell)} |$ をかけて内積をとると

$$\sum_{k=1}^{s} C_k \langle \phi_0^{(\ell)} | H_0 + H' | \phi_0^{(k)} \rangle = E\, C_\ell$$

$(\ell = 1, 2, \cdots s)$

ここで $H'_{\ell k} \equiv \langle \phi_0^{(\ell)} | H' | \phi_0^{(k)} \rangle$ と定義すると上式は

$$\sum_{k=1}^{s} c_k E_0^{(0)} \delta_{k\ell} + \sum_{k=1}^{s} c_k H'_{\ell k} = E c_\ell$$

$$\therefore \quad \underline{c_\ell \left(E_0^{(0)} - E \right) + \sum_{k=1}^{s} c_k H'_{\ell k} = 0} \quad \text{となる.}$$

この式において c_ℓ が non-zero の解をもつためには行列式が0

$$\therefore \quad \det \begin{pmatrix} E_0^{(0)} - E + H'_{11} & H'_{12} & \cdots & H'_{1s} \\ \vdots & \ddots & & \\ & & \ddots & \\ H'_{s1} & & & E_0^{(0)} - E + H'_{ss} \end{pmatrix} = 0$$

(b) $s = 2$ のとき

$$\begin{vmatrix} E_0^{(0)} - E + H'_{11} & H'_{12} \\ H'_{21} & E_0^{(0)} - E + H'_{22} \end{vmatrix} = 0$$

$$\therefore \quad \underline{E = E_0^{(0)} + \frac{1}{2} \left[H'_{11} + H'_{22} \pm \sqrt{\left(H'_{11} + H'_{22} \right)^2 - 4 H'_{11} H'_{22} + 4 H'_{12} H'_{21}} \right]}$$

と求まる.

これは <u>縮退がとける</u> ことを示している.

5.

(a) $$\hat{H} = \frac{1}{2m}\left(\hat{p} - \frac{e}{c}A\right)^2 - \frac{Ze^2}{r} \qquad (Z=1)$$

$$= \frac{1}{2m}\left(\hat{p}^2 - \frac{e}{c}A\hat{p} - \frac{e}{c}\hat{p}\cdot A + \frac{e^2}{c^2}A^2\right) - \frac{e^2}{r}$$

ここで $\hat{p}\cdot A = -i\hbar(\nabla\cdot A + A\cdot\nabla)$

又 Bは一様であるので $\underline{A = \frac{1}{2}B\times r}$ ととれる.

よって $\nabla\cdot A = \frac{1}{2}\nabla\cdot B\times r = -\frac{1}{2}(\nabla\times r)\cdot B = 0$ よって

$$\boxed{\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{p}^2 - \frac{e^2}{r} - \frac{e}{mc}A\cdot\hat{p} + \frac{e^2}{2mc^2}A^2}$$ となる.

よって $$H' = -\frac{e}{mc}A\cdot\hat{p} + \underline{\frac{e^2}{2mc^2}A^2}$$

これは無視する
(小さいので)

$\underline{A = \frac{1}{2}B\times r}$ を代入すると

$$\underline{H' = -\frac{e}{mc}A\cdot\hat{p} = -\frac{e}{2mc}B\times r\cdot\hat{p} = -\frac{e}{2mc}\hat{L}\cdot B}$$

(但し $\hat{L} = r\times\hat{p}$) となる.

(b) $$\underline{H' = -\frac{e}{2mc}\hat{L}\cdot B = -\frac{eB}{2mc}\hat{L}_z}$$ $(B = (0, 0, B))$

$$\psi_{1s}(r) = 2\left(\frac{1}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{r}{a_0}} \cdot \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \qquad \left(a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2}\right)$$

$$\therefore \Delta E_{1s} = \langle\psi_{1s}|H'|\psi_{1s}\rangle = -\frac{eB}{2mc}\langle\psi_{1s}|\hat{L}_z|\psi_{1s}\rangle = \underline{\underline{0}}$$

(c) 2pの波動関数 $(l=1)$ は

$$
\begin{cases}
m_l=1 & \psi_{2p}^{(m=1)} = R_{2p}(r)\, Y_{11}(\theta\varphi) \\
m_l=0 & \psi_{2p}^{(m=0)} = R_{2p}(r)\, Y_{10}(\theta,\varphi) \\
m_l=-1 & \psi_{2p}^{(m=-1)} = R_{2p}(r)\, Y_{1,-1}(\theta\varphi)
\end{cases}
$$

$$R_{2p}(r) = \left(\frac{1}{2a_0}\right)^{\frac{3}{2}} \frac{r}{\sqrt{3}\, a_0} e^{-\frac{r}{2a_0}}$$

よって

$$E_{2p}^{(1)} = \langle \psi_{2p}^{(m_l)} | H' | \psi_{2p}^{(m_l)} \rangle = -\frac{eB}{2mc} \underbrace{\langle Y_{1m_l} | \hat{L}_z | Y_{1m_l} \rangle}_{= \hbar m_l}$$

$$\therefore \quad E_{2p}^{(1)} = -\frac{eB}{2mc} \hbar m_l$$

6. (a)

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \frac{1}{2} m\omega^2 r^2\right) N e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 r^2} = E N e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 r^2}$$

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\hat{L}^2}{\hbar^2 r^2}, \quad l=0 \text{ より } \hat{L}^2 \psi = 0$$

これより

$$
\begin{cases}
\dfrac{\partial}{\partial r} e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 r^2} = -\alpha^2 r\, e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 r^2} \\
\dfrac{\partial}{\partial r}\left(r^2 \dfrac{\partial}{\partial r} e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 r^2}\right) = (-\alpha^2) r^2 (3 - \alpha^2 r^2)\, e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 r^2}
\end{cases}
$$

よって

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\left(N e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 r^2}\right) = \frac{\hbar^2}{2m}\alpha^2 N (3 - \alpha^2 r^2) e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 r^2}$$

$$\therefore \quad \frac{\hbar^2}{2m} N\alpha^2 (3 - \alpha^2 r^2) e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 r^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 r^2 N e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 r^2} = E N e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 r^2}$$

$$\therefore \quad \frac{\hbar^2}{2m}\alpha^4 = \frac{1}{2} m\omega^2 \Rightarrow \boxed{\alpha = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}}$$

$$\boxed{E = \frac{3\hbar^2\alpha^2}{2m} = \frac{3}{2}\hbar\omega}$$

(b)

$$H' = ar \qquad \psi(r) = \left(\frac{\alpha^2}{\pi}\right)^{\frac{3}{4}} e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 r^2} \qquad \left(\alpha = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\right)$$

$$E^{(1)} = \langle \psi | ar | \psi \rangle = a\left(\frac{\alpha^2}{\pi}\right)^{\frac{3}{2}} \underbrace{\int e^{-\alpha^2 r^2}\, r\, d^3 r}_{4\pi \cdot \frac{1}{2\alpha^4}}$$

$$\therefore E^{(1)} = a\left(\frac{\alpha^2}{\pi}\right)^{\frac{3}{2}} 4\pi \frac{1}{2\alpha^4} = \frac{2a}{\alpha\sqrt{\pi}}$$

(c)

$$E^{(1)} = \langle \psi | br^2 | \psi \rangle = b\left(\frac{\alpha^2}{\pi}\right)^{\frac{3}{2}} \int e^{-\alpha^2 r^2} r^2\, d^3 r$$

$$= b \cdot \frac{1}{\alpha^2} \times \frac{3}{2} \qquad \left(\alpha = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\right)$$

$$\therefore \boxed{E^{(1)} = \frac{3b}{2\alpha^2}}$$

(d)

Virial 定理から $\quad \langle r^2 \rangle = \frac{3}{2} \frac{\hbar\omega}{m\omega^2}$

$$\therefore E^{(1)} = b \cdot \frac{3}{2} \frac{\hbar}{m\omega} = \frac{3b}{2\alpha^2}$$ 2つ一致.

(注) Virial 定理

$$\left\langle \frac{p^2}{2m} \right\rangle = \frac{1}{2} \langle \mathbf{r} \cdot \nabla U \rangle = \left\langle \frac{1}{2} m\omega^2 r^2 \right\rangle$$

$$E_0 = \frac{3}{2}\hbar\omega = \left\langle \frac{p^2}{2m} \right\rangle + \left\langle \frac{1}{2} m\omega^2 r^2 \right\rangle$$

$$\therefore \langle r^2 \rangle = \frac{3}{2} \frac{\hbar\omega}{m\omega^2}$$

【NO. 10】 (2010年度) ①

1. (a) $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$, $\psi(x) = N e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 x^2}$

$$\langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle = N^2\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{1}{2}\alpha^2x^2}\left(\frac{d^2}{dx^2}e^{-\frac{1}{2}\alpha^2x^2}\right)dx\right.$$

$$\left. + \frac{1}{2}m\omega^2\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha^2x^2} x^2\, dx\right]$$

$$= N^2\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\infty}^{\infty}(-\alpha^2+\alpha^4x^2)\,e^{-\alpha^2x^2}dx + \frac{1}{2}m\omega^2\int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-\alpha^2x^2}dx\right]$$

$$= N^2\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\left(-\alpha^2\sqrt{\frac{\pi}{\alpha^2}} + \frac{1}{2}\alpha^4\sqrt{\frac{\pi}{\alpha^6}}\right) + \frac{1}{2}m\omega^2\,\frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{\alpha^6}}\right]$$ 但し

$$= \sqrt{\frac{\alpha^2}{\pi}}\left(\frac{\hbar^2}{2m}\,\frac{1}{2}\alpha^2\sqrt{\frac{\pi}{\alpha^2}} + \frac{1}{4}m\omega^2\frac{1}{\alpha^2}\sqrt{\frac{\pi}{\alpha^2}}\right)$$ $\left(N^2 = \sqrt{\frac{\alpha^2}{\pi}}\right)$

(b) $$E = \frac{\langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle} = \frac{\hbar^2\alpha^2}{4m} + \frac{m\omega^2}{4\alpha^2} \geq 2\sqrt{\frac{\hbar^2\alpha^2}{4m}\frac{m\omega^2}{4\alpha^2}} = \frac{1}{2}\hbar\omega$$

Eの最小値 $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$

2. (a) $$\hat{H}\psi = N\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{2}m\omega^2r^2\right]e^{-\alpha r}$$

$$= N\left[\frac{\hbar^2}{2m}\frac{2}{r} - \frac{\hbar^2}{2m}\alpha^2 + \frac{1}{2}m\omega^2r^2\right]e^{-\alpha r}$$

これより $$\langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle = N^2\int_0^\infty\left[\frac{\hbar^2}{2m}\frac{2}{r} - \frac{\hbar^2}{2m}\alpha^2 + \frac{1}{2}m\omega^2r^2\right]e^{-2\alpha r}4\pi r^2dr$$

$$= 4\pi N^2\left[\frac{\hbar^2}{m\alpha}\left(\frac{1}{4}-\frac{1}{8}\right) + \frac{3}{8}\frac{m\omega^2}{\alpha^5}\right]$$

また $$\langle\psi|\psi\rangle = N^2\int_0^\infty e^{-2\alpha r}r^2\,4\pi\,dr = 4\pi N^2\frac{1}{4\alpha^3}$$ より

$$E = \frac{\langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle} = \frac{4\alpha^3}{4\pi N^2}\cdot 4\pi N^2\left(\frac{\hbar^2}{8m\alpha} + \frac{3}{8}\frac{m\omega^2}{\alpha^5}\right)$$

(b)

$$E = \frac{\hbar^2}{2m}\alpha^2 + \frac{3}{2}\frac{m\omega^2}{\alpha^2} \geq 2\sqrt{\frac{\hbar^2\alpha^2}{2m}\frac{3m\omega^2}{2\alpha^2}} = \underline{\sqrt{3}\,\hbar\omega}$$

よって 最小値 $\boxed{E_0 = \sqrt{3}\,\hbar\omega}$ → $1.73\,\hbar\omega$

正しい解 $\left(E = \frac{3}{2}\hbar\omega\right)$ より少し上にある.

(c)

$\psi(r) = N e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 r^2}$ の時

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 r^2} = \frac{\hbar^2}{2m}(3-\alpha^2 r^2)e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 r^2}$$

よって

$$\langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle = 4\pi N^2\int_0^\infty\left[\frac{\hbar^2}{2m}(3-\alpha^2r^2) + \frac{1}{2}m\omega^2r^2\right]e^{-\alpha^2r^2}r^2\,dr$$

$$= 4\pi N^2\left[\frac{\hbar^2\alpha^2}{2m}\left(\frac{3}{4}\sqrt{\frac{\pi}{\alpha^6}} - \frac{3\alpha^2}{8}\sqrt{\frac{\pi}{\alpha^{10}}}\right) + \frac{1}{2}m\omega^2\frac{3}{8}\sqrt{\frac{\pi}{\alpha^{10}}}\right]$$

また

$$\langle\psi|\psi\rangle = 4\pi N^2\frac{1}{4}\sqrt{\frac{\pi}{\alpha^6}}$$

$$\therefore\quad E = \frac{\langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle} = \frac{\hbar^2\alpha^2}{2m}\left(3 - \frac{3\alpha^2}{2\alpha^2}\right) + \frac{1}{2}m\omega^2\frac{3}{2\alpha^2}$$

$$= \frac{3\hbar^2\alpha^2}{4m} + \frac{3}{4}\frac{m\omega^2}{\alpha^2} \geq 2\sqrt{\frac{3\hbar^2\alpha^2}{4m}\frac{3m\omega^2}{4\alpha^2}} = \underline{\underline{\frac{3}{2}\hbar\omega}}$$

よって $\underline{E_0 = \frac{3}{2}\hbar\omega}$

(d) $\psi(r) = N e^{-\alpha r}$ では 正しい答 よりも上になっている

$\psi(r) = N e^{-\frac{\alpha^2 r^2}{2}}$ は 正しい答と一致している

3. (a)

$$\psi(r) = N e^{-\alpha r} \quad \text{の時}$$

$$\langle \psi | -\frac{Ze^2}{r} | \psi \rangle = -(Ze^2)\,4\pi N^2 \cdot \int_0^\infty \frac{1}{r} e^{-2\alpha r} r^2 dr$$

$$= -(Ze^2)\,4\pi N^2 \cdot \frac{1}{(2\alpha)^2}$$

よって

$$\langle V \rangle = \frac{\langle \psi | -\frac{Ze^2}{r} | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} = \frac{-(Ze^2)\,4\pi N^2 \frac{1}{4\alpha^2}}{4\pi N^2 \left(\frac{1}{4\alpha^3}\right)} = \underline{\underline{-Ze^2\alpha}}$$

これより

$$\underline{E = \frac{\hbar^2\alpha^2}{2m} - Ze^2\alpha} \quad \text{となる}$$

(b) 最小値のEは

$$E = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\alpha - \frac{mZe^2}{\hbar^2}\right)^2 - \frac{m(Ze^2)^2}{2\hbar^2} \quad \text{となり}$$

$$\underline{E_0 = -\frac{m(Ze^2)^2}{2\hbar^2}} \quad \text{これは正しい答と一致している?}$$

(c)

$$\psi(r) = N e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 r^2} \quad \text{の時}$$

$$\langle \psi | -\frac{Ze^2}{r} | \psi \rangle = -(Ze^2)\,4\pi N^2 \int_0^\infty \frac{1}{r} e^{-\alpha^2 r^2} r^2 dr$$

$$= -(Ze^2)\,4\pi N^2 \cdot \frac{1}{2\alpha^2}$$

よって

$$E = \frac{\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} = \frac{3\hbar^2\alpha^2}{4m} - \frac{(Ze^2)\left(4\pi N^2 \cdot \frac{1}{2\alpha^2}\right)}{4\pi N^2 \cdot \frac{\sqrt{\pi}}{4\alpha^3}}$$

$$\therefore \underline{E = \frac{3\hbar^2\alpha^2}{4m} - \frac{1}{\sqrt{\pi}} 2Ze^2\alpha} = \frac{3\hbar^2}{4m}\left(\alpha - \frac{4mZe^2}{3\hbar^2\sqrt{\pi}}\right)^2 - \frac{4m(Ze^2)^2}{3\pi\hbar^2}$$

(d) 最低エネルギーは $E_0 = -\dfrac{4m(Ze^2)^2}{3\pi^2\hbar^2} = -0.84\,\dfrac{m(Ze^2)^2}{2\hbar^2}$

正しい答より上にある.

4. (a)

スピンの自由度がある。 ↑, ↓ それぞれに入る。

(b) $H = H_1 + H_2$

1つの電子のエネルギーは $E_0 = -\dfrac{m(Ze^2)^2}{2\hbar^2} = -\underline{\dfrac{2me^4}{\hbar^2}}$

2つ電子があるので $\boxed{E_{tot} = -\dfrac{4me^4}{\hbar^2}} = \underline{\underline{-108.8 \ \mathrm{eV}}}$

(c)

$$E^{(1)} = \langle \Phi_0 | H_{12} | \Phi_0 \rangle$$

$$= \int \phi_{1s}^*(r_1)\, \phi_{1s}^*(r_2)\, \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}\, \phi_{1s}(r_1)\, \phi_{1s}(r_2)\, d^3r_1\, d^3r_2$$

ここで $\phi_{1s}(r) = \dfrac{1}{\sqrt{4\pi}} \left(\dfrac{Z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} 2 e^{-\frac{Z}{a_0} r}$

$\boxed{\alpha \equiv \dfrac{Z}{a_0}}$ とおくと $\boxed{\phi_{1s}(r) = \dfrac{1}{\sqrt{4\pi}} \alpha^{\frac{3}{2}} 2 e^{-\alpha r}}$

$$\therefore \quad E^{(1)} = \left(\frac{1}{\sqrt{4\pi}} \alpha^{\frac{3}{2}} \cdot 2 \right)^4 e^2 \int e^{-2\alpha(r_1 + r_2)} \frac{d^3r_1\, d^3r_2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}$$

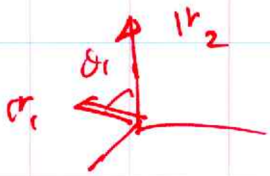
$$|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2| = \sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2 r_1 r_2 \cos\theta_1}$$

(角度)

$$\therefore \quad I \equiv \int \frac{\sin\theta_1\, d\theta_1\, d\varphi_1\, \sin\theta_2\, d\theta_2\, d\varphi_2}{\sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2 r_1 r_2 \cos\theta_1}}$$

$\boxed{t = \cos\theta_1}$ とおくと

$$I = (2\pi)^2 \cdot 2 \int_{-1}^{1} \frac{dt}{\sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2 r_1 r_2 t}} = \underline{\frac{2(2\pi)^2}{r_1 r_2} \left(r_1 + r_2 - |r_1 - r_2| \right)}$$



よって

$$E^{(1)} = \frac{1}{(4\pi)^2}\,\alpha^6 \cdot 2^4 \cdot e^2 \cdot 2(2\pi)^2 \cdot \int_0^\infty r_1 dr_1 \int_0^\infty r_2 dr_2 \;\times$$

$$\left(r_1 + r_2 - |r_1 - r_2|\right) e^{-2\alpha(r_1+r_2)}$$

ここで

$$J \equiv \int_0^\infty r_1 dr_1 \int_0^\infty r_2 dr_2 \left(r_1 + r_2 - |r_1 - r_2|\right) e^{-2\alpha(r_1+r_2)}$$

$$= \int_0^\infty e^{-2\alpha r_1} r_1 dr_1 \left\{ \int_0^{r_1} r_2 dr_2 e^{-2\alpha r_2} 2r_2 + \int_{r_1}^\infty r_2 dr_2 e^{-2\alpha r_2} 2r_1 \right\}$$

$$\begin{cases} \displaystyle\int_0^{r_1} e^{-\alpha r} dr = \frac{1}{\alpha}\left(1 - e^{-\alpha r_1}\right) \\ \displaystyle\int_0^{r_1} r e^{-\alpha r} dr = \frac{1}{\alpha^2}\left(1 - e^{-\alpha r_1}\right) - \frac{r_1}{\alpha} e^{-\alpha r_1} \\ \displaystyle\int_0^{r} r^2 e^{-\alpha r} dr = \frac{1}{\alpha^2}\left(1 - e^{-\alpha r_1}\right) - \frac{2r_1}{\alpha^2} e^{-\alpha r_1} - \frac{r_1^2}{\alpha} e^{-\alpha r_1} \end{cases}$$ [illegible]

$$J = \int_0^\infty 2r_1 e^{-2\alpha r_1} dr_1 \left\{ \int_0^{r_1} r_2^2 dr_2 e^{-2\alpha r_2} + r_1 \int_0^\infty r_2 e^{-2\alpha r_2} dr_2 - r_1 \int_0^{r_1} r_2 e^{-2\alpha r_2} dr_2 \right\}$$

$$= \int_0^\infty 2r_1 e^{-2\alpha r_1} dr_1 \left\{ \frac{2}{(2\alpha)^3}\left(1 - e^{-2\alpha r_1}\right) - \frac{2r_1}{(2\alpha)^2} e^{-2\alpha r_1} - \frac{r_1^2}{2\alpha} e^{-2\alpha r_1} \right.$$

$$\left. + \frac{r_1}{(2\alpha)^2} - r_1 \left[\frac{1}{(2\alpha)^2}\left(1 - e^{-2\alpha r_1}\right) - \frac{r_1}{2\alpha} e^{-2\alpha r_1} \right] \right\}$$

$$= 2\int_0^\infty r_1 e^{-2\alpha r_1} dr_1 \left\{ \frac{2}{(2\alpha)^3} - \frac{2e^{-2\alpha r_1}}{(2\alpha)^3} - \frac{r_1 e^{-2\alpha r_1}}{(2\alpha)^2} \right\}$$

$$= \frac{2}{(2\alpha)^5}\left(2 - \frac{2}{4} - \frac{2}{2^3}\right) = \underline{\underline{\frac{5}{2^6} \cdot \frac{1}{\alpha^5}}}$$

よって

$$E^{(1)} = \frac{1}{(4\pi)^2}\,\alpha^6 \cdot 2^4 \cdot e^2 \cdot 2(2\pi)^2 \cdot \frac{5}{2^6}\,\frac{1}{\alpha^5} = \underline{\underline{\frac{5}{8}\alpha e^2}}$$

$$\therefore \boxed{E^{(1)} = \frac{5}{8}\frac{Ze^2}{a_0}} \quad \left(a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2},\; \alpha = \frac{Z}{a_0}\right)$$

(d)

$\phi(r) = N e^{-\alpha r}$ とする。

$$E_0 = \langle \phi(r_1)\phi(r_2) | H | \phi(r_1)\phi(r_2) \rangle$$

$$= \frac{\hbar^2}{2m}\alpha^2 - Ze^2\alpha + \frac{\hbar^2}{2m}\alpha^2 - Ze^2\alpha + \frac{5}{8}\alpha e^2 \qquad (Z=2)$$

$$= \frac{\hbar^2}{m}\alpha^2 - \frac{27}{8}e^2\alpha = \frac{\hbar^2}{m}\left(\alpha - \frac{27}{16}\frac{me^2}{\hbar^2}\right)^2 - \frac{me^4}{\hbar^2}\underbrace{\left(\frac{27}{16}\right)^2}_{=2.848}$$

$$\therefore \boxed{E_0 = -2.848\left(\frac{me^4}{\hbar^2}\right)}$$

・摂動論： $E_0^{(1)} = -2.75\left(\frac{me^4}{\hbar^2}\right) = -74.8$ [eV]

・実験値： $E_{exp} = -78.9$ [eV]

・変分法： $E_0 = -2.848\left(\frac{me^4}{\hbar^2}\right) = -77.5$ [eV]

5. (a) $\psi = \psi_0 + \epsilon\psi_1 \quad (\epsilon \ll 1)$

$H_0\psi_0 = E_0\psi_0$ とする（ψ_0は正しい解）

また $\langle \psi_0 | \psi_1 \rangle = 0$ と仮定

$$\therefore \langle \psi | \psi \rangle = \langle \psi_0 | \psi_0 \rangle + \epsilon^2 \langle \psi_1 | \psi_1 \rangle = 1 + \epsilon^2$$

$$\langle \psi | H | \psi \rangle = E_0 + \epsilon\left(\langle \psi_1 | H | \psi_0 \rangle + \langle \psi_0 | H | \psi_1 \rangle\right) + \epsilon^2 \langle \psi_1 | H | \psi_1 \rangle$$

$\langle \psi_1 | H | \psi_0 \rangle = E_0 \langle \psi_1 | \psi_0 \rangle = 0$ より

$$E = \frac{\langle \psi | H | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} = \frac{E_0 + \epsilon^2\left(\langle \psi_1 | H | \psi_1 \rangle\right)}{1+\epsilon^2} \cong E_0 + \epsilon^2\left(\langle \psi_1 | H | \psi_1 \rangle - E_0\right)$$

(b) ψがϵのずれていても EはE_0からϵ^2のずれになっている

よって 変分法は エネルギーが正確に求まる!!

1. (a)

$$\begin{cases} \delta(x) = \dfrac{1}{2\pi\hbar}\displaystyle\int e^{\frac{i}{\hbar}px}\,dx \\ \hat{\phi}(p) = \displaystyle\int e^{\frac{i}{\hbar}px}\,\phi(x)\,dx \end{cases}$$

$$\int \hat{\phi}(p')\, e^{-\frac{i}{\hbar}p'x}\frac{dp'}{2\pi\hbar} = \frac{1}{2\pi\hbar}\int e^{\frac{i}{\hbar}(x'-x)p'}dp'\,\phi(x)\,dx' = \int \delta(x-x')\phi(x')dx'$$

$$\underline{= \phi(x)} \qquad \therefore\ \underline{\phi(x) = \frac{1}{2\pi\hbar}\int \hat{\phi}(p) e^{-\frac{i}{\hbar}p'x}\,dp'}$$

(b)

$$\int |\hat{\phi}(p)|^2 \frac{dp}{2\pi\hbar} = \int e^{\frac{i}{\hbar}px}\phi(x)\, e^{-\frac{i}{\hbar}px'}\phi^{+}(x')\,dx\,dx'\,\frac{dp}{2\pi\hbar}$$

$$= \int \delta(x-x')\,\phi(x)\,\phi^{+}(x')\,dx\,dx' = \int |\phi(x')|^2\,dx' = 1$$

(c)

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2\right)\int \hat{\phi}(p)\, e^{-\frac{i}{\hbar}px}\frac{dp}{2\pi\hbar} = E\int \hat{\phi}(p)\, e^{-\frac{i}{\hbar}px}\frac{dp}{2\pi\hbar}$$

$$左辺 = \int \frac{p^2}{2m}\hat{\phi}\, e^{-\frac{i}{\hbar}px}\frac{dp}{2\pi\hbar} - \frac{1}{2}m\omega^2\hbar^2 \underbrace{\int \hat{\phi}(p)\frac{\partial^2}{\partial p^2}e^{-\frac{i}{\hbar}px}\frac{dp}{2\pi\hbar}}_{2回部分積分をして}$$

$$\int \left[\left(\frac{p^2}{2m} - \frac{1}{2}m\omega^2\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial p^2}\right)\hat{\phi}(p)\right] e^{-\frac{i}{\hbar}px}\frac{dp}{2\pi\hbar} = E\int \hat{\phi}(p)\, e^{-\frac{i}{\hbar}px}\frac{dp}{2\pi\hbar}$$

これより

$$\underline{\left(\frac{p^2}{2m} - \frac{1}{2}m\omega^2\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial p^2}\right)\hat{\phi}(p) = E\,\hat{\phi}(p)}$$ となる.

(d)

$$\left(-\frac{1}{2}m\omega^2\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial p^2} + \frac{1}{2m}p^2\right)\hat{\phi}(p) = E\,\hat{\phi}(p)$$

$\underline{M \equiv \dfrac{1}{\omega^2 m}}$, $M\Omega^2 \equiv \dfrac{1}{m} = \dfrac{\Omega^2}{m\omega^2}$ i.e. $\underline{\Omega = \omega}$ として

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2M}\frac{\partial^2}{\partial p^2} + \frac{1}{2}M\Omega^2p^2\right)\hat{\phi}(p) = E\,\hat{\phi}(p)$$

よって 基底エネルギー状態は

$$\underline{E = \frac{1}{2}\hbar\Omega = \frac{1}{2}\hbar\omega}$$

$$\underline{\hat{\phi}(p) = \left(\frac{\tilde{\alpha}^2}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{1}{2}\tilde{\alpha}^2 p^2}}, \quad \underline{\tilde{\alpha} = \sqrt{\frac{M\omega}{\hbar}} = \frac{1}{\sqrt{m\omega\hbar}}}$$

(e) $\phi(x) = \left(\frac{\alpha^2}{\pi}\right)^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 x^2}$

$$\hat{\phi}(p) = \int e^{\frac{i}{\hbar}px}\left(\frac{\alpha^2}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 x^2}\,dx = \left(\frac{\alpha^2}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}}\int e^{-\frac{1}{2}\alpha^2\left(x-\frac{ip}{\hbar\alpha^2}\right)^2-\frac{p^2}{2\hbar^2\alpha^2}}\,dx$$

$$\underline{\therefore \hat{\phi}(p) = \left(\frac{4\pi}{\alpha^2}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{p^2}{2\hbar^2\alpha^2}}}$$

一方 $\hat{\phi}(p) = \left(\frac{\tilde{\alpha}^2}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{1}{2}\tilde{\alpha}^2 p^2} = \underline{\left(\frac{1}{\pi\hbar^2\alpha^2}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{p^2}{2\hbar^2\alpha^2}}}$

で一致している。

2. (a) $a|\phi_0\rangle = 0$

$$\therefore \left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\,x + \frac{\hbar}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\frac{\partial}{\partial x}\right)\underbrace{\langle x|\phi_0\rangle}_{\phi_0(x)} = 0$$

$$\therefore \left(\frac{\partial}{\partial x} + \frac{m\omega}{\hbar}x\right)\phi_0(x) = 0 \quad \text{より}$$

$$\underline{\phi_0(x) = N e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}} \qquad \alpha^2 = \frac{m\omega}{\hbar}$$

(b) $\left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\,x - \frac{\hbar}{\sqrt{2\omega\hbar m}}\frac{\partial}{\partial x}\right)\phi_0(x) = \phi_1(x)$

より

$$\phi_1(x) = \left(\frac{\alpha^2}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}}\left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\,x - \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\frac{m\omega}{\hbar}x\right)e^{-\frac{1}{2}\alpha^2x^2}$$

$$\underline{= \left(\frac{4\alpha^2}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}}(\alpha x)\,e^{-\frac{1}{2}\alpha^2x^2}}$$

3.

(a) ルートの中のオペレータは定義する必要がある。

(b) ψ の成分は 1、よって スピンは ゼロ

(c) $\left(E - \alpha_x p_x c - \alpha_y p_y c - \alpha_z p_z c - \beta m c^2\right)\left(E + \alpha_x p_x c + \alpha_y p_y c + \alpha_z p_z c + \beta m c^2\right)$

$$
\begin{aligned}
= \; & E^2 - \alpha_x^2 p_x^2 c^2 - \alpha_y^2 p_y^2 c^2 - \alpha_z^2 p_z^2 c^2 - \beta^2 m^2 c^2 \\
& - (\alpha_x\alpha_y + \alpha_y\alpha_x) p_x p_y c^2 - (\alpha_y\alpha_z + \alpha_z\alpha_y) p_y p_z c^2 - (\alpha_z\alpha_x + \alpha_x\alpha_z) p_z p_x c^2 \\
& - (\beta\alpha_x + \alpha_x\beta) p_x m c^2 - (\beta\alpha_y + \alpha_y\beta) p_y m c^2 - (\beta\alpha_z + \alpha_z\beta) p_z m c^2 = 0
\end{aligned}
$$

ここで
$$
\begin{cases}
\alpha_x^2 = \alpha_y^2 = \alpha_z^2 = 1, \quad \beta^2 = 1 \\
\alpha_x\alpha_y + \alpha_y\alpha_x = 0, \; \alpha_y\alpha_z + \alpha_z\alpha_y = 0, \; \alpha_z\alpha_x + \alpha_x\alpha_z = 0 \\
\beta\alpha_i + \alpha_i\beta = 0 \quad (i = x, y, z)
\end{cases}
$$
とすると

$$\underline{E^2 - p^2c^2 - m^2c^4 = 0}$$ となり 成り立つ。

(d) $E = \pm\sqrt{p^2c^2 + m^2c^4}$ なので 正負のエネルギーが入っている。自由度は 2.

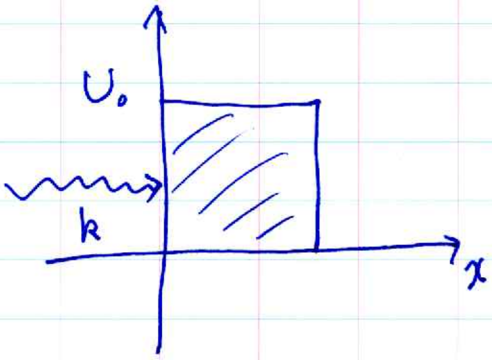
4.

^4He 原子は $\Phi(r_1, r_2) = \varphi_{1s}(r_1)\varphi_{1s}(r_2)$

(a) 1と2の入れかえで対称。

(b) $\Phi_{00} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\chi_1^{\uparrow}\chi_2^{\downarrow} - \chi_1^{\downarrow}\chi_2^{\uparrow}\right)$ が反対称。

5. (a)



$$
\begin{cases}
E = \dfrac{\hbar^2 k^2}{2m} \\
u(x) = e^{ikx} + A e^{-ikx}
\end{cases}
$$

$\underline{x < 0 \text{ のとき}}$

(b) $0 < x < a$ のとき

(i) $E > U_0$ の場合

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2u(x)}{dx^2} + U_0 u(x) = E u(x)$$

$$k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E - U_0)} \text{ とおく} \qquad \frac{d^2u(x)}{dx^2} + \kappa^2 u(x) = 0$$

$$\therefore \underline{u(x) = C_1 e^{i\kappa x} + C_2 e^{-i\kappa x}}$$

(ii) $E < U_0$ の場合

$$K = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(U_0 - E)} \text{ とおく}$$

$$\underline{u(x) = C_1' e^{-Kx} + C_2' e^{Kx}}$$

(c) $x > a$ のとき
$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2u(x)}{dx^2} = E u(x)$$

$$\therefore \underline{u(x) = B e^{ikx}} \quad (透過波)$$

[以降は $E > U_0$ のときの方を記す]

接続条件: $x = 0$
$$\begin{cases} 1 + A = C_1 + C_2 \\ ik - ikA = i\kappa(C_1 - C_2) \end{cases}$$

$x = a$
$$\begin{cases} C_1 e^{i\kappa a} + C_2 e^{-i\kappa a} = B e^{ika} \\ i\kappa(C_1 e^{i\kappa a} - C_2 e^{-i\kappa a}) = ikBe^{ika} \end{cases}$$

$$\therefore \begin{cases} C_1 = \frac{1}{2}\left[\frac{k}{\kappa}(1 - A) + (1 + A)\right] \\ C_2 = \frac{1}{2}\left[1 + A - \frac{k}{\kappa}(1 - A)\right] \end{cases}$$

$$\begin{cases} C_1 e^{i\kappa a} = \frac{1}{2} B e^{ika}\left(1 + \frac{k}{\kappa}\right) \\ C_2 e^{-i\kappa a} = \frac{1}{2} B e^{ika}\left(1 - \frac{k}{\kappa}\right) \end{cases}$$

これらより

$$\begin{cases} A = \dfrac{\left(1 - \frac{k^2}{\kappa^2}\right) e^{-2ika} - \left(1 - \frac{k^2}{\kappa^2}\right)}{\left(1 - \frac{k}{\kappa}\right)^2 - \left(1 + \frac{k}{\kappa}\right)^2 e^{-2ika}} \\[2em] B = \dfrac{1}{1 - \frac{k}{\kappa}} e^{-2ika - ika} \left(1 - \frac{k}{\kappa} + A\left(1 + \frac{k}{\kappa}\right)\right) \end{cases}$$

[$E < U_0$ のとき]　$\kappa \to iK$ とおきかえればよい

$$\begin{cases} A = \dfrac{\left(1 + \frac{k^2}{K^2}\right)\left(1 - e^{-2Ka}\right)}{\left(1 + \frac{ik}{K}\right)^2 e^{-2Ka} - \left(1 - \frac{ik}{K}\right)^2} \\[2em] B = \dfrac{e^{-Ka - 2ika}}{1 - \frac{ik}{K}} \left(1 - \frac{ik}{K} + A\left(1 + \frac{ik}{K}\right)\right) \end{cases}$$

1. (a)

$$\begin{cases} u(x) = A\, e^{\frac{i}{\hbar}(S_0 + \hbar S_1)} \\ u'(x) = A\left(\frac{i}{\hbar}(S_0' + \hbar S_1')\right) e^{\frac{i}{\hbar}(S_0 + \hbar S_1)} \\ u''(x) = A\left\{\left(\frac{i}{\hbar}(S_0'' + \hbar S_1'')\right) e^{\frac{i}{\hbar}(S_0 + \hbar S_1)} + \left(\frac{i}{\hbar}(S_0' + \hbar S_1')\right)^2 e^{\frac{i}{\hbar}(S_0 + \hbar S_1)}\right\} \end{cases}$$

これを Schrödinger 方程式に代入

$$\therefore \begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2m} A\left(\frac{i}{\hbar}(S_0'' + \hbar S_1'') e^{\frac{i}{\hbar}(S_0 + \hbar S_1)} + \left(\frac{i}{\hbar}(S_0' + \hbar S_1')\right)^2 e^{\frac{i}{\hbar}(S_0 + \hbar S_1)}\right. \\ + V(x) A\, e^{\frac{i}{\hbar}(S_0 + \hbar S_1)} = E A\, e^{\frac{i}{\hbar}(S_0 + \hbar S_1)} \end{cases}$$

(i) $\hbar$ の 0 次：

$$\frac{1}{2m} S_0'^2 + V(x) = E$$

$$\therefore \boxed{\frac{dS_0}{dx} = \sqrt{2m(E - V(x))}}$$

(ii) $\hbar$ の 1 次：

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{i}{\hbar} S_0'' + \frac{\hbar^2}{2m}\frac{2}{\hbar} S_0'(x) S_1'(x) = 0$$

$$\therefore\ i\frac{d^2 S_0}{dx^2} = 2\frac{dS_0}{dx}\cdot\frac{dS_1}{dx}$$

(b) (i) $E > V$ の時：

$$\frac{dS_0}{dx} = \sqrt{2m(E - V(x))} = P(x) \text{ とおく}$$

$$S_0(x) = \int^x P(x')\,dx'$$

よって

$$i\frac{dP}{dx} = 2P\frac{dS_1}{dx} \quad \therefore \frac{dS_1}{dx} = \frac{i}{2}\frac{1}{P}\frac{dP}{dx} = \frac{i}{2}\frac{d}{dx}\ln P$$

$$\therefore \boxed{S_1 = \frac{i}{2}\ln P + C}$$

(ii) $E<V$ の時： 同様にして

$$\begin{cases} S_0 = i\int^{x} q(x')\,dx' \\ S_1 = \dfrac{i}{2}\ln q(x) \end{cases}$$

ただし $\underline{q(x) \equiv \sqrt{2m(V(x)-E)}}$

(c) $\underline{\dfrac{1}{2m}\left(\dfrac{dS_0}{dx}\right)^2 + V = E}$

これは Hamilton-Jacobi の方程式である.

$\underline{p(x) = \dfrac{dS_0}{dx}}$ とすると $\underline{\dfrac{1}{2m}p^2 + V = E}$ となる

2.
$$\begin{cases} x<0 \text{ のとき} & u(x) = e^{ikx} \\ x>a \quad 〃 & u(x) = Be^{ikx} \end{cases}$$

$0<x<a$ の範囲では $u(x)$ は WKB の式で与えられる

$$u(x) = C\,e^{-\frac{1}{\hbar}\int_{x_0}^{x} q(x')dx'}, \quad q(x) \equiv \sqrt{2m(V-E)}$$

$$\begin{cases} x=0 \text{ で接続：} & 1 = C\,e^{-\frac{1}{\hbar}\int_{x_0}^{0} q(x')dx'} \\ x=a \text{ で接続} & C\,e^{-\frac{1}{\hbar}\int_{x_0}^{a} q(x')dx'} = Be^{ika} \end{cases}$$

よって $\boxed{Be^{ika} = e^{-\frac{1}{\hbar}\int_0^a q(x')dx'}}$ となる

よって $\underline{|B|^2 = e^{-\frac{2a}{\hbar}\sqrt{2m(V_0-E)}}}$ を得る.

一方 厳密解は

$$B = \frac{e^{-Ka-ika}}{\frac{K}{k}-i}\left(\frac{K}{k}-i+A\left(\frac{K}{k}+i\right)\right)$$

但し
$$A = \frac{\left(\frac{K^2}{k^2}+1\right)\left(1-e^{-2Ka}\right)}{\left(\frac{K}{k}+i\right)^2 e^{-2Ka}-\left(\frac{K}{k}-i\right)^2}$$

ここで $\boxed{Ka \gg 1}$ とする. よって $e^{-2Ka} \simeq 0$

$\left(\text{但し } \frac{K}{k} \ll 1\right)$ $\therefore$ $A=1$

これより

$$|B|^2 = \frac{4K^2}{k^2}e^{-\frac{2a}{\hbar}\sqrt{2m(V_0-E)}}$$ となる.

(これは WKB の答と一致している)

3. (a) $u(x) = Ae^{ikx}$

$u(x) = u(x+L)$ より $e^{ikL}=1$

$\therefore$ $\boxed{k = \frac{2\pi}{L}n, \quad n=0,\pm1,\cdots}$

(b) $\langle u_m | \hat{p}x - x\hat{p} | u_n \rangle = -i\hbar\,\delta_{mn}$

但し $|u_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{L}}e^{i\frac{2\pi}{L}nx}$

(a)より $\hat{p}u_n = \frac{2\pi n}{L}\hbar\, u_n$ より

$$\langle u_n | \frac{2\pi n}{L}\hbar\, x - x\,\frac{2\pi m}{L}\hbar\, | u_m \rangle = -i\hbar\,\delta_{mn}$$

$$\boxed{\frac{2\pi\hbar}{L}(n-m)\langle u_n | x | u_m \rangle = -i\hbar\,\delta_{mn}}$$

となる.

(c) $n=m$ のとき

左辺 $=0$　右辺 $=-i\hbar$ で矛盾.

(これは 周期的境界条件をつけたとき
$\hat{p}$ のエルミート性を一般的には
使えない事になっている)

(証)

$$\langle u_n | \hat{p} x | u_m \rangle = \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} u_n^{\dagger} \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} x\right) u_m(x)\, dx$$

$$= -i\hbar \left[x\, u_n^{\dagger} u_m\right]_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} + i\hbar \int \left(\frac{\partial u_n^{\dagger}}{\partial x}\right) x\, u_m\, dx$$

$$\therefore \langle u_n | \hat{p} x | u_m \rangle = -i\hbar \frac{1}{L} \left[e^{-\frac{2\pi i (n-m)x}{L}} x\right]_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} + \langle \hat{p} u_n | x | u_m \rangle$$

(a) $n \neq m$ のとき

$$\left[e^{-\frac{2\pi i (n-m)x}{L}} x\right]_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} = 0 \quad \text{より}$$

$$\underline{\langle u_n | \hat{p} x | u_m \rangle = \langle \hat{p} u_n | x | u_m \rangle}$$

OK

(b) $n=m$ のとき

$$-i\hbar \frac{1}{L} \left[e^{-\frac{2\pi}{L} i (n-m)x} x\right]_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} = -i\hbar \quad \text{より}$$

$$\underline{\langle u_n | \hat{p} x | u_m \rangle - \langle \hat{p} u_n | x | u_n \rangle = -i\hbar}$$

となり

式は回避される事がわかる.