量　子　力　学　演　習

平成 20 年度

日本大学理工学部物理学科

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

$$\boxed{A\varphi = a\varphi} \qquad \text{が成り立つ.}$$

   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 $H = \frac{p^2}{2m} + U(x)$ で与えられる場合、量子力学では運動量 p を $\hat{p} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$ と置き換える (運動量演算子という) ので、H は、$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x)$ 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*. 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．

$$e^A e^B = e^{A+B+\frac{\hbar}{2}} \tag{1}$$

(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 $e^{Bt} = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}B^n t^n$ を用いて、次式を示せ．

$$[A, e^{Bt}] = \hbar t e^{Bt}$$

(c) 以上より、$f(t)$ に対する微分方程式は

$$\frac{df(t)}{dt} = \hbar t f(t)$$

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．

5.　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 $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)$ 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.

6.　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

$$\boxed{A\boldsymbol{u} = \lambda\boldsymbol{u}}$$ 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 $\boldsymbol{u}$, $\boldsymbol{v}$ の内積 (複素内積) を

$$\boxed{(\boldsymbol{u}, \boldsymbol{v}) = \sum_{i=1}^{N} u_i^* v_i}$$ 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.

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．但し、 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. 微分方程式

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+U_0\right)u(x)=Eu(x)$$

の一般解を求めたい．但し、U_0 は定数．今、$\alpha=\frac{2m}{\hbar^2}(E-U_0)$ とすると

$$\left(\frac{d^2}{dx^2}+\alpha\right)u(x)=0$$

と変形できる．この時、この微分方程式の一般解を α が正の時と負の時に分けて求めよ．

4. 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．

5. $U(x)$ が下記で与えられるような箱型ポテンシャルとする．

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

但し、U_0 は正．この時、束縛状態のエネルギー固有値 E を与える式を求めたい．
はじめにポテンシャルの図を描き、粒子が束縛されたらエネルギー E はどの辺に来るのか、大雑把な位置に E を描き入れよ．
時間に依らない Schrödinger 方程式を領域 I $(0<x<a)$ と領域 II $(a<x)$ に分けて解き、領域 I の波動関数を $u_I(x)$, 領域 II の波動関数を $u_{II}(x)$ とする．この時、境界条件は、

$$u_I(0)=0,\qquad u_{II}(\infty)=0$$

である．また、$x=a$ における波動関数 $u(x)$ とその微分係数 $u'(x)$ の接続条件は

$$u_I(a)=u_{II}(a),\qquad {u_I}'(a)={u_{II}}'(a)$$

であり、これより、エネルギー固有値 E を与える式を求めよ．

6.　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 方程式の束縛状態における固有関数は必ず、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.

7.　剛体の箱

$$U(x) = \begin{cases} \infty & : \ |x| > a \\ 0 & : \ |x| < a \end{cases}$$

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 $\int_{-a}^{a} |u(x)|^2 dx = 1$ 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.

8.　箱型ポテンシャル

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

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.

$$\text{(i)} \quad \alpha = \beta \tan \beta a, \qquad \text{(ii)} \quad \alpha = -\beta \cot \beta a$$

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.

   $$A\varphi = a\varphi, \quad B\varphi = b\varphi$$

   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

$$\boxed{\hat{P}\hat{H}(x)\hat{P}^{-1} = \hat{H}(-x)} \qquad \text{と変換される．}$$

(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*. ハミルトニアンを $\hat{H} = \dfrac{p^2}{2M} + U(x)$ とした時、1 次元 Schrödinger 方程式は

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

で与えられる．ここで、E_n, u_n は量子数 n で指定されるエネルギー固有値とその固有関数である．この時、

$$\sum_{m=1}^{\infty} (E_m - E_n)|x_{nm}|^2 = \frac{\hbar^2}{2M} \tag{1}$$

を示したい．但し、行列要素 x_{nm} は $\boxed{x_{nm} \equiv < u_n|x|u_m > \equiv \int_{-\infty}^{\infty} u_n^*(x) x u_m(x) dx}$

(a) $[\hat{p}, x] = -i\hbar$ を用いて、$[\hat{H}, x]$ を計算せよ．

(b) $[[\hat{H}, x], x]$ を計算し、$< u_n|[[\hat{H}, x], x]|u_n >= -\dfrac{\hbar^2}{M}$ を示せ．

(c) 上式において、 $\{u_n\}$ が完全系である事を用いて式 (1) を示せ．

（注）$\{u_n\}$ が完全系とは $\boxed{\sum_n |u_n >< u_n| = 1}$ を満たす事である．

これは書き直すと $\sum_n u_n(x) u_n^*(x') = \delta(x - x')$ に対応している．

5. 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 $< x >= 0, \quad < \hat{p} >= 0$ 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．

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

$$\boxed{2 < \Psi_n | \frac{\hat{\boldsymbol{p}}^2}{2M} | \Psi_n > = < \Psi_n | \boldsymbol{r} \cdot \nabla U | \Psi_n >} \quad \text{を示せ.}$$

これは、量子力学における Virial 定理である.

7*. $\delta(x)$ 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

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} - U_0 \delta(x) \right) u(x) = E u(x) \tag{2}$$

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) $u(\xi)$ に対する境界条件は何か？

(c) 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.

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

(e) $f(\xi)$ 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.

(f) 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.

(g) 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

$$\frac{d^2H_n}{d\xi^2} - 2\xi\frac{dH_n}{d\xi} + 2nH_n = 0 \tag{4}$$

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 $\boxed{\int_{-\infty}^{\infty}|u_n(x)|^2dx = 1}$ 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 $\hat{H} = \dfrac{\hat{p}^2}{2m} + \dfrac{1}{2}m\omega^2 x^2$ 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 $\mathbf{L}$ を

$$\boldsymbol{L}=\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p},\qquad \boldsymbol{p}=-i\hbar\nabla \qquad \text{で定義する.}$$

この時、$\boldsymbol{L}^2=L_x^2+L_y^2+L_z^2$ を極座標で書くと、

$$\boxed{\boldsymbol{L}^2=-\hbar^2\left(\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right)} \qquad \text{である.}$$

(a) ハミルトニアン $H=\dfrac{\boldsymbol{p}^2}{2M}+V(r)$ を角運動量 $\mathbf{L}$ 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 $\boldsymbol{L}^2$ が交換する事を示せ.

(c) この事は、ハミルトニアンと $\boldsymbol{L}^2$ 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. $\boldsymbol{L}^2$ 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、

$$f_\ell(x,y,z) = C r^\ell Y_\ell(\theta,\varphi)$$

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

$$\boxed{L_z Y_{\ell m}(\theta, \varphi) = \hbar m Y_{\ell m}(\theta, \varphi)} \quad \text{を示せ.}$$

(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

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

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*. 原子核の中で束縛されている中性子に対して、問 1 (c) による箱型ポテンシャルによりその束縛状態が記述されるものと仮定しよう．

(a) 今、 ある原子核を考えよう．一番外側にいる中性子は問 1 (c) の箱型ポテンシャルのような 1 体ポテンシャルで良く記述されているとする．この時、半径は $a=3$ fm, $V_0=60$ MeV とする．この時、中性子の $s-$ 波の束縛エネルギーはいくらであるか？[$\hbar c=197$ MeV fm を使ってよい．]

(b)** 次に、$p-$ 波を考える．(a) によるポテンシャルの場合、$p-$ 波の束縛状態が存在するかどうか調べよ．但し、式 (1) の解は $\alpha=\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V_0+E)}$, $\xi=\alpha r$ とおいた時、

$$R(\xi)=c_1j_1(\xi)+c_2n_1(\xi)$$

で与えられる．ここで、c_1, c_2 は定数．また、$j_1(\xi)$, $n_1(\xi)$ は球ベッセル関数で

$$j_1(\xi)=\frac{\sin\xi}{\xi^2}-\frac{\cos\xi}{\xi},\quad n_1(\xi)=-\frac{\cos\xi}{\xi^2}-\frac{\sin\xi}{\xi}$$

与えられる．

3. 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、 $m=\dfrac{m_1m_2}{m_1+m_2}$ 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．

4*. 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.

5. 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.

$n_r = 0$ $\boxed{\ell = 0 \longrightarrow n = 1 \quad 1s\text{− 状態}}$

$n_r = 0$ $\boxed{\ell = 1 \longrightarrow n = 2 \quad 2p\text{− 状態}}$
$n_r = 1$ $\ell = 0 \longrightarrow n = 2$ $2s$− 状態

$n_r = 0$ $\ell = 2 \longrightarrow n = 3$ $3d$− 状態
$n_r = 1$ $\ell = 1 \longrightarrow n = 3$ $3p$− 状態
$n_r = 2$ $\ell = 0 \longrightarrow n = 3$ $3s$− 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

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

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.

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\boldsymbol{L}^2}{2mr^2} + \frac{1}{2}m\omega^2r^2\right)\Psi(\boldsymbol{r}) = E\Psi(\boldsymbol{r})$$

この時、基底状態は $1s-$ 状態であり、その波動関数は

$$\Psi_{1s}(\boldsymbol{r}) = Ne^{-\frac{1}{2}\alpha^2r^2}$$

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 $V = \dfrac{1}{2}m\omega^2r^2$ 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 $\boldsymbol{J}$ 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 $\boldsymbol{s}$ は Pauli 行列 $\boldsymbol{\sigma}$ により $\boxed{\boldsymbol{s} = \frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\sigma}}$ で記述される．[No.1 の問 1 参照].

(a) スピンオペレータ $\boldsymbol{s}$ 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 $\boldsymbol{s}_1$, 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 $\boldsymbol{s}_2$, その固有関数を $\chi^{(2)}_{m_2}$ とする．全体の合成スピンは $\boldsymbol{S} = \boldsymbol{s}_1 + \boldsymbol{s}_2$ である．

(a) この $\boldsymbol{S}$ 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 $\boldsymbol{S}^2$, 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、$\boldsymbol{S}^2$, 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) $\chi^{(1)}_{\frac{1}{2}}\chi^{(2)}_{-\frac{1}{2}}$, $\chi^{(1)}_{-\frac{1}{2}}\chi^{(2)}_{\frac{1}{2}}$ は $\boldsymbol{S}^2$ 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、$\boldsymbol{S}^2$, 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 $\boldsymbol{S} = \boldsymbol{s}_1 + \boldsymbol{s}_2$ に対して

$$P_{12}\boldsymbol{S}P_{12}^{-1} = \boldsymbol{S}$$

を示せ．

(c) この事から、$\boldsymbol{S}^2$, 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

$$\delta(x) = \begin{cases} 0 & x \neq 0 \\ \infty & x = 0 \end{cases}$$

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 $\boldsymbol{A}$ はベクトルポテンシャルであり、磁場 $\boldsymbol{B}$ 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 $\boldsymbol{p}$ 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 $\boldsymbol{p}$ 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 $\boldsymbol{p}$ 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．

$$(E - \alpha_x p_x c - \alpha_y p_y c - \alpha_z p_z c - \beta m c^2)(E + \alpha_x p_x c + \alpha_y p_y c + \alpha_z p_z c + \beta m c^2) = 0 \tag{4}$$

この時、$\alpha_x, \alpha_y, \alpha_z, \beta$ 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、$\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ 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

$$(\alpha_x p_x c + \alpha_y p_y c + \alpha_z p_z c + \beta m c^2)\Psi = E\Psi$$

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

$$\text{エネルギー：}\ E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega, \quad n = 0, 1, 2\cdots$$

$$\alpha = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$$

(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

$$\psi_n(x) = \left(\frac{\alpha^2}{4^n \pi (n!)^2}\right)^{\frac{1}{4}} H_n(\alpha x) e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 x^2}$$

$$\text{但し}\quad H_n(\xi) = (-)^n e^{\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2}$$

$H_0(\xi) = 1$

$H_1(\xi) = 2\xi$

$H_2(\xi) = 4\xi^2 - 2$

$H_3(\xi) = 8\xi^3 - 12\xi$

$H_4(\xi) = 16\xi^4 - 48\xi^2 + 12$

(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： $\quad E_n = -\dfrac{mZ^2e^4}{2n^2\hbar^2} = -\dfrac{m}{2n^2}\left(\dfrac{Z}{137}\right)^2 \qquad : m = 0.511\ \ [\mathrm{MeV}/c^2]$

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

$$\int_0^\infty e^{-\alpha x}dx = \frac{1}{\alpha}, \quad \int_0^\infty xe^{-\alpha x}dx = \frac{1}{\alpha^2}, \quad \int_0^\infty x^2e^{-\alpha x}dx = \frac{2}{\alpha^3}$$

$$\int_0^\infty x^n e^{-\alpha x}dx = (-1)^n \frac{\partial^n}{\partial\alpha^n}\frac{1}{\alpha} = \frac{n!}{\alpha^{n+1}}$$

(b) Gaussian の積分

$$\int_{-\infty}^\infty e^{-\alpha^2x^2}dx = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha^2}}, \quad \int_{-\infty}^\infty x^2e^{-\alpha^2x^2}dx = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{\alpha^6}}, \quad \int_{-\infty}^\infty x^4e^{-\alpha x^2}dx = \frac{3}{4}\sqrt{\frac{\pi}{\alpha^{10}}}$$

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）: $f(u) = u^2, \qquad u(x) = e^x$
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 $\qquad f(x) = u^2 = e^{2x}$ 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）: $f(x,y) = x^n y^n \qquad \frac{\partial f(x,y)}{\partial x} = n x^{n-1} y^n$

(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）: $f(x(t), y(t), t) = x^2 y^2 e^{at}$
$x = \sin t, \quad y = \cos t$
公式 (*) より
$\frac{df}{dt} = 2xy^2 e^{at} \cos t - 2yx^2 e^{at} \sin t + a x^2 y^2 e^{at}$
$\qquad = \sin 2t \cos 2t e^{at} + \frac{1}{4} a (\sin 2t)^2 e^{at}$
一方 直接計算すると
$f(x(t), y(t), t) = \sin^2 t \cos^2 t e^{at} = \frac{1}{4}(\sin 2t)^2 e^{at}$
$\frac{df}{dt} = \sin 2t \cos 2t e^{at} + \frac{1}{4} a (\sin 2t)^2 e^{at}$

2. 合成変換

$(x, y) \to (u, v)$ namely $(u(x, y), v(x, y))$

$$du = \frac{\partial u}{\partial x} dx + \frac{\partial u}{\partial y} dy \qquad (*)$$

$$dv = \frac{\partial v}{\partial x} dx + \frac{\partial v}{\partial y} dy \qquad (*)$$

$$\frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial u}{\partial x}\frac{\partial}{\partial u} + \frac{\partial v}{\partial x}\frac{\partial}{\partial v} \qquad (*)$$

$$\frac{\partial}{\partial y} = \frac{\partial u}{\partial y}\frac{\partial}{\partial u} + \frac{\partial v}{\partial y}\frac{\partial}{\partial v} \qquad (*)$$

3. 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．

$$J = \begin{vmatrix} \frac{\partial u}{\partial x} & \frac{\partial u}{\partial y} \\ \frac{\partial v}{\partial x} & \frac{\partial v}{\partial y} \end{vmatrix} \qquad (*)$$

4. 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 : $\quad (ds)^2 = (dx)^2 + (dy)^2 + (dz)^2 \qquad (*)$

Polar Coordinates : $\quad (ds)^2 = (dr)^2 + (rd\theta)^2 + (r\sin\theta d\phi)^2 \qquad (*)$

Circular Coordinates : $\quad (ds)^2 = (dr)^2 + (rd\theta)^2 + (dz)^2 \qquad (*)$

(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）：

$$(1+x)^\alpha = 1 + \alpha x + \frac{1}{2}\alpha(\alpha-1)x^2 + \cdots \qquad (*) \tag{16}$$

$$\sqrt{1+x} = 1 + \frac{1}{2}x - \frac{1}{8}x^2 + \cdots \qquad (*) \tag{17}$$

$$\frac{1}{1+x} = 1 - x + x^2 - x^3 + \cdots \qquad (*) \tag{18}$$

$$\ln(1+x) = x - \frac{1}{2}x^2 + \frac{1}{3}x^3 - \frac{1}{4}x^4 + \cdots \qquad (*) \tag{19}$$

$$e^x = 1 + x + \frac{1}{2}x^2 + \cdots \qquad (*) \tag{20}$$

$$\sin x = x - \frac{1}{6}x^3 + \cdots \qquad (*) \tag{21}$$

$$\cos x = 1 - \frac{1}{2}x^2 + \cdots \qquad (*) \tag{22}$$

**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.

5. 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.

6. 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 $\boldsymbol{a} \cdot \boldsymbol{b} = a_x b_x + a_y b_y + a_z b_z$

$$\begin{aligned} \boldsymbol{a} \times \boldsymbol{b} &= \begin{vmatrix} \mathbf{e_x} & \mathbf{e_y} & \mathbf{e_z} \\ a_x & a_y & a_z \\ b_x & b_y & b_z \end{vmatrix} \qquad (*) & (23) \\ &= (a_y b_z - a_z b_y)\mathbf{e_x} + (a_z b_x - a_x b_z)\mathbf{e_y} + (a_x b_y - a_y b_x)\mathbf{e_z} \qquad (*) & (24) \end{aligned}$$

絶対値 $\mid \boldsymbol{a} \mid = \sqrt{a_x^2 + a_y^2 + a_z^2}$

7. 行列

* n 次正方行列 * $\quad A = \{A_{ij}\}, i = 1, \cdots, n \qquad j = 1, \cdots, n$

複素共役 $\quad (A^*)_{ij} = A^*_{ij}$

*転置行列 * $\quad (A^t)_{ij} = A_{ji}$

エルミート $\quad (A^\dagger)_{ij} = A^*_{ji}$

*エルミート行列 * $\quad A = A^\dagger$

* 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 $\det(A) = e^{\mathrm{Tr}(\ln A)}$

8. 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,

$$\begin{aligned} \det(U^\dagger) &= \sum_P \epsilon_{(m_1 \cdots m_n)} A^*_{m_1 1} \cdots A^*_{m_n n} && (25) \\ &= (\sum_P \epsilon_{(m_1 \cdots m_n)} A_{m_1 1} \cdots A_{m_n n})^* && (26) \\ &= (\sum_P \epsilon_{(m_1 \cdots m_n)} A_{1 m_1} \cdots A_{n m_n})^* = (\det(U))^* && (27) \end{aligned}$$

$$\mid \det(U) \mid^2 = 1, \qquad \mid \det(U) \mid = \pm 1$$

9. 部分積分

Using the identity

$$(fg)^{'} = f^{'} g + f g^{'}$$

Putting $f^{'} = F$,

$$\int F g dx = fg - \int f g^{'} dx \qquad (*)$$

example

$$\int \ln x dx = x \ln x - x - C$$