量子力学第三（学部）・量子力学特論（大学院）

押山淳教員

2009/02/05

- 1. は必須問題．2. と 3. は選択問題なので，1 つを選んで解答してください．

試験問題

1. 中性の水素分子 H_2 の電子状態を考える．ひとまず電子同士の相互作用を無視したハミルトニアン,

$$H_0 = -t \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} (a^\dagger_{1\sigma} a_{2\sigma} + a^\dagger_{2\sigma} a_{1\sigma}) \tag{1}$$

を考える（$t > 0$）．ここで，$a^\dagger_{k\sigma}$，$a_{k\sigma}$ は $\boldsymbol{R}_k$ の位置の水素原子の $1s$ 軌道に σ 向きスピンをもつ電子を生成あるいは消滅させる演算子である．従って，これらは反交換関係

$$[a_{k\sigma}, a^\dagger_{k'\sigma'}]_+ = a_{k\sigma} a^\dagger_{k'\sigma'} + a^\dagger_{k'\sigma'} a_{k\sigma} = \delta_{kk'}\delta_{\sigma\sigma'},\ [a_{k\sigma}, a_{k'\sigma'}] = 0,\ [a^\dagger_{k\sigma}, a^\dagger_{k'\sigma'}]_+ = 0 \tag{2}$$

を満たしている．t は $1s$ 状態の軌道関数 φ を用いて,

$$\begin{aligned} -t &= \int \mathrm{d}\boldsymbol{r} \varphi(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{R}_1) \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\boldsymbol{r}) \right] \varphi(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{R}_2) \\ &= \int \mathrm{d}\boldsymbol{r} \varphi(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{R}_2) \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\boldsymbol{r}) \right] \varphi(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{R}_1) \end{aligned}$$

と書ける．ここで $V(\boldsymbol{r})$ は原子核からのポテンシャルエネルギーである．[*1]

(a) 以下の演算子を定義する．

$$b^\dagger_{1\sigma} = \frac{1}{\sqrt{2}}(a^\dagger_{1\sigma} + a^\dagger_{2\sigma}),\ b^\dagger_{2\sigma} = \frac{1}{\sqrt{2}}(a^\dagger_{1\sigma} - a^\dagger_{2\sigma})$$

(2) より，以下の反交換関係,

$$[b_{i\sigma}, b^\dagger_{i'\sigma'}]_+ = \delta_{ii'}\delta_{\sigma\sigma'}$$

を導け．

[*1] 正確には,

$$\epsilon = \int \mathrm{d}\boldsymbol{r} \varphi(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{R}_k) \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\boldsymbol{r}) \right] \varphi(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{R}_k)$$

なる各 $1s$ 状態のエネルギーが登場するはずであるが，ここでは簡単のため，それを 0 とした．エネルギーの原点をずらしたと云ってもよい．

(b) ハミルトニアン (1) が

$$H_0 = -t \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} (b_{1\sigma}^\dagger b_{1\sigma} - b_{2\sigma}^\dagger b_{2\sigma})$$

となることを導け.

(c) 電子が存在しない状態を $|0\rangle$ と書く.（すなわち，$a_{k\sigma}|0\rangle = b_{i\sigma}|0\rangle = 0$.）$|G\rangle = b_{1\uparrow}^\dagger b_{1\downarrow}^\dagger|0\rangle$ は H_0 の固有状態であることを示し，その固有値を求めよ.

次に電子同士の相互作用を考える．簡単な模型として，反対向きのスピンをもつ 2 電子が同じ原子の $1s$ 軌道を占有したときに，U だけエネルギーが上昇すると考える．そのハミルトニアンは，

$$H_1 = U(n_{1\uparrow}n_{1\downarrow} + n_{2\uparrow}n_{2\downarrow}) \tag{3}$$

である．ここで粒子数演算子 $n_{k\sigma} = a_{k\sigma}^\dagger a_{k\sigma}$ を導入した.

(d) $\langle G|H_1|G\rangle$ を計算せよ.

(e) H_0 の各固有状態でのエネルギーは，H_1 を考慮したときどのように変化するか．H_1 に対する一次の摂動論の範囲で論ぜよ.（具体的にエネルギー補正を計算してもよいし，十分に説得力のある議論で補正の大きさを論じてもよい.）

2. ベクトルポテンシャル $\boldsymbol{A}$ とスカラーポテンシャル ϕ で記述される静電磁場のもとでの，固有エネルギー E の状態に対する 4 成分波動関数 ψ は，Dirac 方程式：

$$(E - e\phi)^2\psi = \left[c^2\left(\boldsymbol{p} - \frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)^2 + m^2c^4 - \frac{e\hbar c}{2}\sum_{\lambda\mu}\sigma_{\lambda\mu}F_{\lambda\mu}\right]\psi$$

ここで,

$$F_{\lambda\mu} \equiv \left(\frac{\partial A_\mu}{\partial x_\lambda} - \frac{\partial A_\lambda}{\partial x_\mu}\right)$$

であり，4 次元座標 $(x_1, x_2, x_3, x_4) = (x, y, z, ict)$，ベクトルポテンシャルの第 4 成分 $A_4 = i\phi$ を導入した．また,

$$\sigma_{\lambda\mu} = \frac{i}{2}(\gamma_\mu\gamma_\lambda - \gamma_\lambda\gamma_\mu)$$

であり，4 次元行列 γ_λ は，2 次元のパウリ行列：

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix},\ \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix},\ \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix},\ \sigma_4 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

を用いて,

$$\gamma_\lambda = i\begin{bmatrix} 0 & -\sigma_\lambda \\ \sigma_\lambda & 0 \end{bmatrix},\ (\lambda = 1,\ 2,\ 3),\ \gamma_4 = \begin{bmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{bmatrix}$$

と表される．$E = mc^2 + W$ とし,

$$\frac{W - e\phi}{mc^2} \ll 1$$

の非相対論的極限が成り立っているとする．このとき，4 成分波動関数の上の 2 成分 ψ_+ と下の 2 成分 ψ_- とを混ぜる 4 次元行列を無視することができる．この場合，Dirac 方程式は，Schrodinger 方程式：

$$W\psi_+ = \left[\frac{1}{2m}\left(\boldsymbol{p} - \frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)^2 + e\phi - \frac{e\hbar}{2mc}(\sigma_1B_1 + \sigma_2B_2 + \sigma_3B_3)\right]\psi_+$$

に帰着することを示せ.

3. 散乱ポテンシャル $V(\boldsymbol{r})$ によって入射波 $\Psi_{\mathrm{in}}(\boldsymbol{r}) = e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}$ が散乱される場合，遠方での波動関数の漸近形は，

$$f(\boldsymbol{k}_f) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int \mathrm{d}\boldsymbol{r}' e^{-i\boldsymbol{k}_f\cdot\boldsymbol{r}'} V(\boldsymbol{r}')\Psi(\boldsymbol{r}')$$

なる関数を用いて，

$$\Psi \simeq \Psi_{\mathrm{in}} + \frac{e^{ikr}}{r} f(\boldsymbol{k}_f)$$

となることを示せ．ただし，$\boldsymbol{k}_f = k\boldsymbol{r}/|\boldsymbol{r}|$ である．球対称なポテンシャル井戸：

$$V(r) = \begin{cases} -V_0 & r \le a \\ 0 & r > a \end{cases}$$

であるとき，散乱角 θ（$\boldsymbol{k}_i$ と $\boldsymbol{k}_f$ のなす角度）への微分散乱断面積 $\mathrm{d}\sigma/\mathrm{d}\Omega$ を，Born 近似[*2]を用いて計算せよ．

[*2] $f(\boldsymbol{k}_f)$ の表式において，Ψ を Ψ_{in} に置き換える近似．

略解

*3

1. (a) (2) より,

$$[b_{1\sigma}, b^\dagger_{1\sigma'}]_+ = \frac{[a_{1\sigma}+a_{2\sigma}, a^\dagger_{1\sigma'}+a^\dagger_{2\sigma'}]_+}{2} = \frac{[a_{1\sigma}, a^\dagger_{1\sigma'}]_+ + [a_{2\sigma}, a^\dagger_{2\sigma'}]_+}{2} = \delta_{\sigma\sigma'}$$

となる．同様に,

$$[b_{1\sigma}, b^\dagger_{2\sigma'}]_+ = \frac{[a_{1\sigma}, a^\dagger_{1\sigma'}]_+ - [a_{2\sigma}, a^\dagger_{2\sigma'}]_+}{2} = 0$$

となる．

(b) 定義より,

$$a^\dagger_{1\sigma} = \frac{(b^\dagger_{1\sigma}+b^\dagger_{2\sigma})}{2}, a^\dagger_{2\sigma} = \frac{(b^\dagger_{1\sigma}-a^\dagger_{2\sigma})}{2}$$

が成り立つので，これを H_0 に代入して整理すると,

$$H_0 = -t\sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow}(b^\dagger_{1\sigma}b_{1\sigma} - b^\dagger_{2\sigma}b_{2\sigma})$$

を得る．

(c)

$$\begin{aligned}
H_0|G\rangle &= -t\sum_\sigma(b^\dagger_{1\sigma}b_{1\sigma} - b^\dagger_{2\sigma}b_{2\sigma})b^\dagger_{1\uparrow}b^\dagger_{1\downarrow}|0\rangle \\
&= -t(b^\dagger_{1\uparrow}b_{1\uparrow} + b^\dagger_{1\downarrow}b_{1\downarrow})b^\dagger_{1\uparrow}b^\dagger_{1\downarrow}|0\rangle \\
&= -t[b^\dagger_{1\uparrow}(1-b^\dagger_{1\uparrow}b_{1\uparrow})b^\dagger_{1\downarrow}|0\rangle - b^\dagger_{1\downarrow}b^\dagger_{1\uparrow}(1-b^\dagger_{1\downarrow}b_{1\downarrow})|0\rangle] \\
&= -2tb^\dagger_{1\uparrow}b^\dagger_{1\downarrow}|0\rangle
\end{aligned}$$

固有値は $-2t$.

(d) $(i\sigma)$ 状態を占有している粒子数演算子，$N_{i\sigma} = b^\dagger_{i\sigma}b_{i\sigma}$ を用いると，ハミルトニアンは

$$H_0 = -t\sum_\sigma(N_{1\sigma} - N_{2\sigma})$$

と書けるので，b 粒子を生成した状態が H_0 の固有状態である．電子は 2 個なので，$|G\rangle$ 以外に,

$$|E_{p1}\rangle = b^\dagger_{1\uparrow}b^\dagger_{2\uparrow}|0\rangle, \quad |E_{p2}\rangle = b^\dagger_{1\downarrow}b^\dagger_{2\downarrow}|0\rangle, |E_{ap1}\rangle = b^\dagger_{1\uparrow}b^\dagger_{2\downarrow}|0\rangle, |E_{ap2}\rangle = b^\dagger_{1\downarrow}b^\dagger_{2\uparrow}|0\rangle, |E_2\rangle = b^\dagger_{2\uparrow}b^\dagger_{2\downarrow}|0\rangle$$

なる固有状態がある．固有値は，反交換関係を用いて前問のように計算してもよいが，それぞれの固有状態が $(i\sigma)$ 状態を何個占有しているかを考えれば，明らかに,

$$H_0|E_{p1}\rangle = 0|E_{p1}\rangle, H_0|E_{p2}\rangle = 0|E_{p2}\rangle, H_0|E_{ap1}\rangle = 0|E_{ap1}\rangle, H_0|E_{ap2}\rangle = 0|E_{ap2}\rangle, H_0|E_2\rangle = 2t|E_2\rangle$$

である．

*3 入力者が意味をわかっていないので深刻な打ち間違いが存在する可能性があります．

(e)

$$
\begin{aligned}
\langle G|H_1|G\rangle &= \frac{U}{4}\langle 0|b_{1\downarrow}b_{1\uparrow}[(b^\dagger_{1\uparrow}+b^\dagger_{2\uparrow})(b_{1\uparrow}+b_{2\uparrow})(b^\dagger_{1\downarrow}+b^\dagger_{2\downarrow})(b_{1\downarrow}+b_{2\downarrow})\\
&\qquad +(b^\dagger_{1\uparrow}-b^\dagger_{2\uparrow})(b_{1\uparrow}-b_{2\uparrow})(b^\dagger_{1\downarrow}-b^\dagger_{2\downarrow})(b_{1\downarrow}-b_{2\downarrow})]b^\dagger_{1\uparrow}b^\dagger_{1\downarrow}|0\rangle\\
&= \frac{U}{4}\langle 0|b_{1\downarrow}b_{1\uparrow}[(b^\dagger_{1\uparrow}+b^\dagger_{2\uparrow})(b^\dagger_{1\uparrow}+b^\dagger_{2\uparrow})(b_{1\downarrow}+b_{2\downarrow})(b_{1\downarrow}+b_{2\downarrow})\\
&\qquad +(b^\dagger_{1\uparrow}-b^\dagger_{2\uparrow})(b^\dagger_{1\uparrow}-b^\dagger_{2\uparrow})(b_{1\downarrow}-b_{2\downarrow})(b_{1\downarrow}-b_{2\downarrow})]b^\dagger_{1\uparrow}b^\dagger_{1\downarrow}|0\rangle\\
&= \frac{U}{4}\langle 0|b_{1\downarrow}b_{1\uparrow}b_{1\uparrow}[(b^\dagger_{1\downarrow}+b^\dagger_{2\downarrow})(b^\dagger_{1\uparrow}+b^\dagger_{2\uparrow})+(b^\dagger_{1\downarrow}-b^\dagger_{2\downarrow})(b^\dagger_{1\uparrow}-b^\dagger_{2\uparrow})]b_{1\uparrow}b_{1\downarrow}b^\dagger_{1\uparrow}b^\dagger_{1\downarrow}|0\rangle\\
&= -\frac{U}{4}\langle 0|b_{1\downarrow}b_{1\uparrow}b_{1\uparrow}[(b^\dagger_{1\downarrow}+b^\dagger_{2\downarrow})(b^\dagger_{1\uparrow}+b^\dagger_{2\uparrow})+(b^\dagger_{1\downarrow}-b^\dagger_{2\downarrow})(b^\dagger_{1\uparrow}-b^\dagger_{2\uparrow})]|0\rangle\\
&= \frac{U}{2}\langle 0|b_{1\downarrow}b_{1\uparrow}b^\dagger_{1\uparrow}b^\dagger_{1\downarrow}|0\rangle = \frac{U}{2}
\end{aligned}
$$

(f) 前問の計算に倣って反交換関係を用いて計算すると，

$$
\langle E_{p1}|H_1|E_{p1}\rangle = \langle E_{p2}|H_1|E_{p2}\rangle = 0, \langle E_{ap1}|H_1|E_{p1}\rangle = \langle E_{ap2}|H_1|E_{p2}\rangle = \langle E_2|H_1|E_2\rangle = \frac{U}{2}
$$

を得る．（計算略．）計算せずに以下のような説明でもよい．H_1 ハミルトニアンは，同一の原子に 2 個の電子がいるときにエネルギーが U だけ上昇するというハミルトニアンである．パウリの排他原理からその際には 2 つの電子のスピンは反対向きである．$|E_{p1}\rangle$ と $|E_{p2}\rangle$ 状態は，平行なスピンをもった 2 電子が生成された状態なので，決して同一原子に 2 個の電子が来ることはない．したがって H_1 の期待値を取ると 0 となる．ほかの状態は，$a^\dagger_{1\sigma}|0\rangle$ と $a^\dagger_{2\sigma}|0\rangle$ との重ね合わせであり，同一原子に 2 個の電子が来る確率と 2 つの原子に分かれて存在する確率は半々である．従って，$U/2$ だけエネルギーが上昇する．

2. λ と μ が 1 から 3 のとき，

$$
\gamma_\lambda\gamma_\mu = \begin{bmatrix}\sigma_\lambda\sigma_\mu & 0\\ 0 & \sigma_\lambda\sigma_\mu\end{bmatrix},\ \sigma_{\lambda\mu} = \frac{i}{2}\begin{bmatrix}\sigma_\mu\sigma_\lambda-\sigma_\lambda\sigma_\mu & 0\\ 0 & \sigma_\mu\sigma_\lambda-\sigma_\lambda\sigma_\mu\end{bmatrix}
$$

である．パウリ行列間の関係式，$\sigma_1\sigma_2 = \sigma_2\sigma_1 = i\sigma_3$ 等を用いて，

$$
\sigma_{12} = \overline{\sigma}_3 = \begin{bmatrix}\sigma_3 & 0\\ 0 & \sigma_3\end{bmatrix},\ \sigma_{23} = \overline{\sigma}_1 = \begin{bmatrix}\sigma_1 & 0\\ 0 & \sigma_1\end{bmatrix},\ \sigma_{31} = \overline{\sigma}_2 = \begin{bmatrix}\sigma_2 & 0\\ 0 & \sigma_2\end{bmatrix}
$$

である．

$$
\sigma_{\lambda\mu} = -\sigma_{\mu\lambda},\ F_{12} = (\mathrm{rot}\boldsymbol{A})_3,\ F_{23} = (\mathrm{rot}\boldsymbol{A})_1,\ F_{31} = (\mathrm{rot}\boldsymbol{A})_2,\ F_{\lambda\mu} = -F_{\mu\lambda}
$$

を用いれば，

$$
\sum_{\lambda=1}^{3}\sum_{\mu=1}^{3}\sigma_{\lambda\mu}F_{\lambda\mu} = F_{12}(\sigma_{12}-\sigma_{21}) + F_{23}(\sigma_{23}-\sigma_{32}) + F_{31}(\sigma_{31}-\sigma_{13}) = 2(B_2\overline{\sigma}_3 + B_1\overline{\sigma}_1 + B_2\overline{\sigma}_2)
$$

となる．$E = W + mc^2$ を Dirac 方程式に代入し，左辺の $(W - e\phi)^2$ の項は小さいので無視すると，

$$
2mc^2(W - e\phi)\psi = \left[c^2\left(\boldsymbol{p} - \frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)^2 - \frac{e\hbar c}{2}\sum_{\lambda\mu}\sigma_{\lambda\mu}F_{\lambda\mu}\right]\psi
$$

となり，これを整理すると

$$W\Psi = \left[\frac{1}{2m}\left(\boldsymbol{p} - \frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)^2 + e\phi - \frac{e\hbar}{4mc}\sum_{\lambda\mu}\sigma_{\lambda\mu}F_{\lambda\mu}\right]\psi$$

となる．ここで，$\sigma_{\lambda\mu}$ なる 4 次元行列のうち，添字に 4 が含まれるものは，上の 2 成分と下の 2 成分を混ぜ，

$$\sigma_{4i} = -i\begin{bmatrix} 0 & \sigma_i \\ \sigma_i & 0 \end{bmatrix}$$

とする．そこで最後の項でこの行列が含まれる項を無視すれば，上の 2 成分に対する Schrodinger 方程式を得る．

3. Born 近似では，

$$f(\theta) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int \mathrm{d}\boldsymbol{r}' e^{-i(\boldsymbol{k}_f - \boldsymbol{k}_i)\cdot\boldsymbol{r}'}V(\boldsymbol{r}')$$

散乱ベクトル

$$\boldsymbol{q} = \boldsymbol{k}_f - \boldsymbol{k}_i$$

と散乱角 θ

$$q = \sqrt{k_f^2 + k_i^2 - 2k_f k_i \cos\theta} = 2k\sin\frac{theta}{2}$$

なる関係がある．散乱角 θ で定義される立体角への微分散乱断面積は，

$$\frac{\mathrm{d}\sigma(\theta)}{\mathrm{d}\Omega} = \frac{m^2}{4\pi^2\hbar^4}\left|\int \mathrm{d}\boldsymbol{r}' e^{-i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}'}V(\boldsymbol{r}')\right|^2$$

で与えられる．中心力 $V(\boldsymbol{r}) = V(r)$ の場合には，角度部分の積分が実行できて，

$$f(\theta) = -\frac{2m}{\hbar}\int_0^\infty V(r)\frac{\sin qr}{q}r\mathrm{d}r$$

となる．ポテンシャル井戸の形を代入して，

$$\begin{aligned} f(\theta) &= \frac{2mV_0}{\hbar^2 q}\int_0^a r\sin qr\mathrm{d}r \\ &= \frac{2mV_0}{\hbar^2 q}\int_0^a r\frac{e^{iqr} - e^{-iqr}}{2i}\mathrm{d}r \\ &= \frac{2mV_0}{\hbar^2 q^3}(\sin qa - qa\cos qa) \end{aligned}$$

を得る．微分散乱断面積はこの散乱振幅の絶対値の 2 乗.