量子力学第三

初貝安弘教員

2007/02/07

定義されていない記号等は授業で用いた慣用にしたがって適宜解釈せよ.

1. 1 次元の質量 m のポテンシャル $V(x)$ 中での量子力学を考える.
   (a) 固有エネルギー $E = \dfrac{\hbar^2 k^2}{2m}$ の波動関数 Ψ が次の積分方程式を満たすことを示せ. ただし $(E + \dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{d^2}{dx^2})G_0(x) = \delta(x), \Psi_0 = \dfrac{1}{2\pi}e^{ikx}$ である.

   $$\Psi(x) = \Psi_0(x) + \int dx' G_0(x-x')V(x')\Psi(x')$$

   (b) $G_0(x) = -i\dfrac{2m}{\hbar^2}\dfrac{i}{k}e^{ik|x|}, k > 0$ が G_0 の条件を満たすことを示せ.
   (c) $V(x) = g\delta(x)$ のとき, 境界条件 $\Psi(x) \propto e^{ikx}(x \to \infty,\ \neq 0 : 実)$ の下で積分方程式を用いて波動関数を $x < 0$ と $x > 0$ とで求め, それより反射率を求めよ.
   (d) $V(x) = -|g|\delta(x)$ のとき, 束縛状態のエネルギーを積分方程式を用いて求めよ.
2. ディラック方程式 $i\hbar\dfrac{\partial}{\partial t}\Psi = H_D\Psi, H_D = c\boldsymbol{\alpha}\cdot(\boldsymbol{p} - e\boldsymbol{A}) + \beta mc^2 + e\phi, \boldsymbol{p} = -i\hbar\boldsymbol{\nabla}$ に従う粒子を考える.
   (a) $\rho = \Psi^*\Psi, \boldsymbol{j} = c\Psi^*\alpha\Psi$ として連続の方程式 $\dfrac{\partial\rho}{\partial t} + \mathrm{div}\ \boldsymbol{j} = 0$ を導け.
   (b) 自由粒子系 $(\phi = 0, \boldsymbol{A} = \boldsymbol{0})$ に対して, 表示 $\boldsymbol{\alpha} = \rho_1 \otimes \boldsymbol{\sigma}, \boldsymbol{\beta} = \rho_3 \otimes \boldsymbol{I}_2$ $(\boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\delta}$ はパウリ行列) において全角運動量 $\boldsymbol{J} = \boldsymbol{L} + \boldsymbol{S}, \boldsymbol{L} = \boldsymbol{r} \times \boldsymbol{p}, \boldsymbol{S} = \hbar\boldsymbol{\sigma}/2$ が保存することを示そう.
      i. テンソル積について, $\mathrm{Tr}\boldsymbol{A} \otimes \boldsymbol{B} = \mathrm{Tr}\boldsymbol{A}\mathrm{Tr}\boldsymbol{B}$ を説明せよ.
      ii. $(\boldsymbol{A} \otimes \boldsymbol{B})(\boldsymbol{C} \otimes \boldsymbol{D}) = (\boldsymbol{AC} \otimes \boldsymbol{BD})$ を示せ.
      iii. パウリ行列が $\sigma_i\sigma_j = -\sigma_j\sigma_i (i \neq j)$ を満たすことに注意して, $[H_D, \boldsymbol{J}] = 0$ を示せ. もしくは

      $$\rho_1(\sigma_1) = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix},\ \rho_2(\sigma_2) = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix},\ \rho_3(\sigma_3) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

      という表示を用いよ.
3. 規格直交化されたスピン軌道関数を $\bar{\phi}_{j\mu}(\tau) = \phi_j(\boldsymbol{r})\chi_\mu(\sigma), \tau = (\boldsymbol{r}, \sigma), j = 1, 2, \cdots, \mu = \uparrow, \downarrow, \sigma = 1, 2)$ とする.
   (a) $\{\phi_j(\boldsymbol{r})\}$ が規格直交化されているための条件と完全であるための条件をそれぞれ示せ.
   (b) $\chi_\mu(\sigma)$ が規格直交化されているための条件と完全であるための条件を列ベクトル $\boldsymbol{\chi}_\mu = (\chi_\mu(1), \chi_\mu(2))^T$ でそれぞれ示せ.
   (c) フェルミ粒子の場の演算子 $\psi_\sigma(\boldsymbol{r}) = \displaystyle\sum_{j\mu}\bar{\phi}_{j\mu}(\boldsymbol{r}, \sigma)c_{j\mu}$ について, $\{\psi_\sigma(\boldsymbol{r}), \psi^*_{\sigma'}(\boldsymbol{r}')\}$ を計算せよ. ただし, $\{c_{j\mu}, c^*_{j'\mu'}\} = \delta_{jj'}\delta_{\mu\mu'}$ である.

(d) スピン軌道関数 $\bar{\phi}_{i\mu}.\bar{\phi}_{j\nu}$ の間の交換積分 $K(i\mu, j\nu)$ は次のように定義される. ($v(\boldsymbol{r}) = \dfrac{1}{4\pi\epsilon_0|\boldsymbol{r}|}$)

$$K(i\mu, j\nu) = \int d\tau \int d\tau' \bar{\phi}^*_{i\mu}(\tau')\bar{\phi}_{j\nu}(\tau')\bar{\phi}^*_{j\nu}(\tau)\bar{\phi}_{i\mu}(\tau)v(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')$$

$\mu \neq \nu$ のとき, $K(i\mu, j\nu) = 0$ を示せ.

(e) フント則について知るところを述べよ.

4. 他電子系の例として他電子原子のエネルギー準位を考えよう.

(a) 電子配置 $(3d)^2$ の縮退度はいくつか.

(b) 電子間のクーロン相互作用を摂動的に扱い $(3d)^2$ から得られる多重項を求め, 状態数が前問と一致することを確認せよ. なお $L = 0, 1, 2, 3, 4, \cdots$ に対して $S, P, D, F, G, \cdots$ と書く.

(c) ハミルトニアン H と可換なエルミート演算子 A について $[H, A] = 0$ のとき, A の異なる固有値に属する状態間で H の行列要素が 0 となることを示せ.

5. 物質の存在しないときの輻射場を一辺 L の立方体中で周期的境界条件のもとでクーロンゲージを用いて量子化する. このとき, 電場 $\boldsymbol{E}$ と磁場 $\boldsymbol{H}$ は次のように書ける.

$$\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r}) = -\frac{1}{\sqrt{\epsilon_0 L^3}} \sum_{k,\sigma=1,2} p_{k\sigma} e_{k\sigma} e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}},\ \boldsymbol{H}(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{\sqrt{\epsilon_0}} \sum_{k,\sigma=1,2} q_{k\sigma} i\boldsymbol{k} \times \boldsymbol{e}_{k\sigma} e^{+i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}$$

ここで $[q_{k\sigma}, p_{k'\sigma'}] = i\hbar\delta_{kk'}\delta_{\sigma\sigma'}, \boldsymbol{e}_{k\sigma} = \boldsymbol{e}_{-k\sigma}, \boldsymbol{e}_{k\sigma}\cdot\boldsymbol{e}_{k\sigma'} = \delta_{\sigma\sigma'}$ とする.

(a) 周期的境界条件から許されるベクトル $\boldsymbol{k}$ について説明せよ.

(b) 以下のように定義されるハミルトニアン H を計算せよ. ただし $\epsilon_0\mu_0 c^2 = 1$ である.

$$H = \frac{1}{2}\int d^3r(\epsilon_0\boldsymbol{E}^2 + \frac{1}{\mu_0}\boldsymbol{H}^2)$$

(c) 次の定義式を用いて, まず $p_{k\sigma}, q_{k\sigma}$ の間の交換関係を確認し, ハミルトニアンを書き直せ. ただし, $a_{k\sigma}$ は光子の消滅演算子である.

$$q_{k\sigma} = \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_k}}(a^*_{-k\sigma} + a_{k\sigma}),\ p_{k\sigma}) = i\sqrt{\frac{\hbar\omega_k}{2}}(a^*_{k\sigma} - a_{-k\sigma})$$