2010度　量子力学2試験問題

以下の問題すべてに答えなさい。試験時間は90分である。

1. 次のハミルトニアンで記述される1粒子系を考える（ただし, $\lambda > 0$）.

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1, \quad \hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{k}{2}\hat{x}^2, \qquad \hat{H}_1 = \lambda \hat{x}^l. \tag{1}$$

$\alpha = \sqrt{mk}/\hbar$ と置くと, 非摂動ハミルトニアン $\hat{H}_0$ の基底状態の規格化された波動関数およびエネルギーはそれぞれ, $\varphi_0(x) = (\frac{\alpha}{\pi})^{1/4}\exp(-\alpha x^2/2)$, $E_0 = \frac{\hbar}{2}\sqrt{\frac{k}{m}}$ である.

(a) $l = 3, 4$ のときそれぞれについて, $\hat{H}_1$ についての **1次**の摂動による基底状態のエネルギーの変化 $\delta E_0^{(1)}$ を求めなさい. ただし, n が0または自然数のとき,

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

となることを使ってよい. ここに, $n = 0$ のとき $(2n-1)!! = 1$ とする.

(b) 次に, $k = 0$ かつ $l = 4$ の場合について考える.
a をパラメータとする規格化された波動関数 $\varphi(x) = (\frac{a}{\pi})^{1/4}\exp(-ax^2/2)$ を試行関数として基底状態のエネルギーの近似値を変分法で求めよう.

i. 運動エネルギー $\hat{T} \equiv \hat{p}^2/2m$, ポテンシャルエネルギー $\hat{V} \equiv \lambda\hat{x}^4$ および全エネルギー $\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}$ の期待値, $T[a]$, $V[a]$, $E[a]$ を求めなさい. ここに, たとえば,

$$T[a] = \int_{-\infty}^{\infty} dx \varphi(x) \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} \right) \varphi(x), \tag{2}$$

である.

ii. $T[a]$ と $V[a]$ それぞれの a 依存性を図示し, その振る舞いについての物理的解釈を述べなさい.

iii. 変分法により最適の a を決定し, $\hat{H}$ の基底状態のエネルギーの近似値を求めなさい.

2. 　次のハミルトニアンで記述されるスピン $\frac{1}{2}$ を持つフェルミオン2体系の定常状態を考える.

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1, \quad \hat{H}_0 = \sum_{i=1,2} \frac{-\hbar^2}{2m}\nabla_i^2, \quad \hat{H}_1 = V(|\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2|). \tag{3}$$

重心および相対座標 $\boldsymbol{R} = (\boldsymbol{r}_1 + \boldsymbol{r}_2)/2, \boldsymbol{r} = \boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2$ を使うと, 全波動関数は $\Psi(\boldsymbol{r}_1, \sigma_1, \boldsymbol{r}_2, \sigma_2) = \Phi(\boldsymbol{R})\phi(\boldsymbol{r})\chi(\sigma_1, \sigma_2)$ と表される. $\chi(\sigma_1, \sigma_2)$ は合成系のスピン波動関数である.

(a) 2 粒子の合成スピンの大きさが S のときの規格化されたスピン状態ベクトルを $\chi(\sigma_1, \sigma_2) = |S, S_z\rangle$ と書く. ただし, S_z は磁気量子数である. 1 番目の粒子のスピン $\hat{\boldsymbol{s}}_1$ が上向きで 2 番目の粒子のスピン $\hat{\boldsymbol{s}}_2$ が下向きのときの合成系の状態ベクトルを $|\uparrow\rangle\otimes|\downarrow\rangle$ などと書くことにする。これらの記法を用いて, この 2 フェルミオン系のスピン状態ベクトル $|S, S_z\rangle$ をすべて書き下しなさい. たとえば、$|1, 1\rangle = |\uparrow\rangle\otimes|\uparrow\rangle$ である.

(b) 相互作用ポテンシャルが中心力なので, $\phi(\boldsymbol{r}) = A(r)Y_{lm}(\theta,\varphi)$ と表すことができる. ここに、$Y_{lm}(\theta,\varphi) = Y_{lm}(\hat{\boldsymbol{r}})$ は l 階の球面調和関数である. 波動関数の反対称化に注意して, $S=1$ および $S=0$ それぞれについて, l の偶奇をその理由と共に書きなさい.

(c) i. $\hat{H}_1$ を無視した非摂動状態を考える. このとき, $\phi(\boldsymbol{r})$ は自由粒子のシュレーディンガー方程式に従う. 固有エネルギーが $\epsilon = \hbar^2k^2/2\mu$ であるときの $S=1$ および $S=0$ に対する相対軌道波動関数 $\phi_{オ}(\boldsymbol{r}), \phi_{パ}(\boldsymbol{r})$ をそれぞれ求めなさい. ただし, μ は 2 フェルミオン系の換算質量である.

ii. 相互作用が短距離力であり $\hat{H}_1 = V_0\delta(\boldsymbol{r})$ と近似できるときを考える. ここに, V_0 は定数であり, $\delta(\boldsymbol{r})$ はディラックのデルタ関数である. $S=1,\ S=0$ それぞれについて, $\hat{H}_1$ による 1 次の摂動エネルギーを求めなさい. $V_0 > 0$ の場合, $S=1, S=0$ のどちらの状態がエネルギー的に有利か答えなさい. また, その物理的な理由を簡単に述べなさい.

3. 次のように「テンソル演算子」S_{12} を定義する:

$$S_{12} = 3(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\hat{\boldsymbol{r}})(\boldsymbol{\sigma}_2\cdot\hat{\boldsymbol{r}}) - \boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2 = 3\sqrt{5}\left[[\boldsymbol{\sigma}_1\otimes\boldsymbol{\sigma}_2]^{(2)}\otimes[\hat{\boldsymbol{r}}\otimes\hat{\boldsymbol{r}}]^{(2)}\right]^{(0)}. \tag{4}$$

ここに, $[\hat{\boldsymbol{r}}\otimes\hat{\boldsymbol{r}}]^{(2)}_m = \sqrt{8\pi/15}Y_{2m}(\hat{\boldsymbol{r}})$ であり, $[\boldsymbol{\sigma}_1\otimes\boldsymbol{\sigma}_2]^{(2)}$ は 2 個の 1 階のテンソル $\boldsymbol{\sigma}_i$ $(i=1,\,2)$ から構成した 2 階のテンソル. その μ 成分はクレブッシュ・ゴルダン係数を用いて

$$[\boldsymbol{\sigma}_1\otimes\boldsymbol{\sigma}_2]^{(2)}_\mu = \sum_{m_1}(1m_1 1\mu-m_1|2\mu)\sigma_{1\,m_1}\sigma_{2\,\mu-m_1}. \tag{5}$$

ただし, $\sigma_{\pm1} = \mp\frac{1}{\sqrt{2}}(\sigma_x \pm i\sigma_y),\quad \sigma_0 = \sigma_z.$
合成スピンが S の状態ベクトルを $|S,\,S_z\rangle$ と書くとき、

$$\langle 1,\,S_z|S_{12}|0,\,0\rangle = \langle 0,\,0|S_{12}|0,\,0\rangle = 0, \tag{6}$$

したがって,

$$S_{12}|0,\,0\rangle = 0, \tag{7}$$

となることを示しなさい。(ヒント：ウイグナー・エッカルトの定理を用いなさい.)