2010度　量子力学2試験問題解答例

1(a) i. $l=3$ のとき.

$$\delta E_0^{(1)} = \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} dx\lambda x^3 e^{-\alpha x^2} = 0. \tag{1}$$

なぜなら，奇関数と偶関数の積の積分だから.

ii. $l=4$ のとき.

$$\begin{aligned}\delta E_0^{(1)} &= \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} dx\lambda x^4 e^{-\alpha x^2}\\ &= \lambda\sqrt{\frac{\alpha}{\pi}}\frac{3}{4}\sqrt{\frac{\pi}{\alpha^5}}\\ &= \frac{3\lambda}{4\alpha^2}. \end{aligned}\tag{2}$$

(b) 次に，$k=0$ かつ $l=4$ の場合の変分法の適用.

i.

$$\begin{aligned}T[a] &= \int_{-\infty}^{\infty} dx\varphi(x)\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\right)\varphi(x),\\ &= \frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\infty}^{\infty} dx\left(\frac{d\varphi(x)}{dx}\right)^2\\ &= \frac{\hbar^2}{2m}\sqrt{\frac{a}{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} dx\, a^2x^2\mathrm{e}^{-ax^2}\\ &= \frac{\hbar^2}{2m}\sqrt{\frac{a}{\pi}}a^2\frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{a^3}}\\ &= \frac{\hbar^2}{4m}a. \end{aligned}\tag{3}$$

$$V[a] = \sqrt{\frac{a}{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} dx\lambda x^4\mathrm{e}^{-ax^2} = \frac{3\lambda}{4a^2}.$$

従って、

$$E[a] = \frac{\hbar^2}{4m}a + \frac{3\lambda}{4a^2}. \tag{4}$$

ii. グラフは省略.

解釈: まず, a を大きくすると, 波動関数は傾きが急になり原点付近への局在化が増大することに注意する．運動エネルギーの期待値 $T[a]$ は波動関数の傾き（微分係数）が大きいほど増大するので, a と共に増大する.
一方, ポテンシャルは $|x|$ の増加関数なので, a が大きくなって波動関数が局在するほどその斥力効果を避けることができる．したがって, $V[a]$ は a と共に減少する.

iii.

$$\frac{dE[a]}{da} = \frac{\hbar^2}{4m} - \frac{3\lambda}{2a^3} = 0. \tag{5}$$

これを解いて,

$$a = \left(\frac{6m\lambda}{\hbar^2}\right)^{1/3} \equiv \bar{a}. \tag{6}$$

E の近似値は,

$$E[\bar{a}] = \frac{3}{8}\left(\frac{6\lambda\hbar^4}{m^2}\right)^{1/3}. \tag{7}$$

2.

(a)

$$\begin{aligned}
|1,\,1\rangle \quad &= |\uparrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle, \\
|1,\,0\rangle \quad &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle \otimes |\downarrow\rangle + |\downarrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle), \\
|1,\,-1\rangle \quad &= |\downarrow\rangle \otimes |\downarrow\rangle, \\
|0,\,0\rangle \quad &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle \otimes |\downarrow\rangle - |\downarrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle).
\end{aligned}$$

(b) パウリ原理より, $\Psi(\boldsymbol{r}_2\,\sigma_2, \boldsymbol{r}_1\,\sigma_1) = -\Psi(\boldsymbol{r}_1\,\sigma_1, \boldsymbol{r}_2\,\sigma_2)$. ところが, $\boldsymbol{r}_1$ と $\boldsymbol{r}_2$ の入れ替えに対して, $\boldsymbol{R} = (\boldsymbol{r}_1 + \boldsymbol{r}_2)/2$ は不変であり, 相対座標は $\boldsymbol{r} = \boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2 \to -\boldsymbol{r}$ と符号を変える（パリティ変換される）ので, $\Psi(\boldsymbol{r}_2\,\sigma_2, \boldsymbol{r}_1\,\sigma_1) = \Phi(\boldsymbol{R})\psi(-\boldsymbol{r})\chi(\sigma_2, \sigma_1)$ である．さらに, $\phi(-\boldsymbol{r}) = A(r)Y_{lm}(-\hat{\boldsymbol{r}})$. ところが, 球面調和関数の性質より,

$$Y_{lm}(-\hat{\boldsymbol{r}}) = (-1)^l Y_{lm}(\hat{\boldsymbol{r}}). \tag{8}$$

以上をまとめると,

$$(-1)^l Y_{lm}(\hat{\boldsymbol{r}})\chi(\sigma_2,\,\sigma_1) \;=\; -Y_{lm}(\hat{\boldsymbol{r}})\chi(\sigma_1,\,\sigma_2). \tag{9}$$

上の問題の解答より, $S = 1$ のとき, スピン波動関数 $\chi(\sigma_1,\,\sigma_2)$ は粒子の入れ替えに対して対称であるから,

$$(-1)^l Y_{lm}(\hat{\boldsymbol{r}}) = -Y_{lm}(\hat{\boldsymbol{r}}). \tag{10}$$

よって, $l =$ 奇数.

$S = 0$ のときは, 逆に $\chi(\sigma_1,\, \sigma_2)$ は反対称だから,

$$(-1)^l Y_{lm}(\hat{\boldsymbol{r}}) = Y_{lm}(\hat{\boldsymbol{r}}). \tag{11}$$

よって, $l =$ 偶数.

(c) i. $\hat{H}_1$ を無視するとき, $\phi(\boldsymbol{r})$ は次ぎの自由粒子のシュレーディンガー方程式に従う:

$$\frac{-\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2}{dx^2}\phi(\boldsymbol{r}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu}\phi(\boldsymbol{r}). \tag{12}$$

この解は,

$$\phi(\boldsymbol{r}) = c_1 \mathrm{e}^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} + c_2 \mathrm{e}^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}. \tag{13}$$

ただし, 固有エネルギーが $\epsilon = \hbar^2 k^2/2\mu$ であることを用いた.

$S = 1$ のとき（オルソ状態と呼ぶ）, パウリ原理より $\phi(-\boldsymbol{r}) = -\phi(\boldsymbol{r})$ だから, $c_2 = -c_1$ でなければならない. したがって,

$$\phi_{オ}(\boldsymbol{r}) = C_k\left(\mathrm{e}^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} - \mathrm{e}^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}\right).$$

C_k は規格化定数. このとき, $\boldsymbol{k} \neq 0$ であることに注意する.

同様にして, $S = 0$ のとき（パラ状態のとき）は,

$$\phi_{パ}(\boldsymbol{r}) = C'_k\left(\mathrm{e}^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} + \mathrm{e}^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}\right).$$

ii.

$$\delta E_{オ} = |C_k|^2 \int d\boldsymbol{r} \left(\mathrm{e}^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} - \mathrm{e}^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}\right) V_0 \delta(\boldsymbol{r}) \left(\mathrm{e}^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} - \mathrm{e}^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}\right) = 0.$$

$$\delta E_{パ} = |C'_k|^2 \int d\boldsymbol{r} \left(\mathrm{e}^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} + \mathrm{e}^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}\right) V_0 \delta(\boldsymbol{r}) \left(\mathrm{e}^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} + \mathrm{e}^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}\right) = 4|C'_k|^2 V_0.$$

したがって, $V_0 > 0$ のとき, $S = 1$ の状態の方がエネルギー的に有利になる。

パラ状態ではこの斥力の効果を受けるが, オルソ状態では軌道波動関数の反対称化のためにこの斥力を避けることができるからである。

3. ウイグナー・エッカルトの定理より,

$$\begin{aligned}
\langle S,\, S_z | S_{12} | 0,\, 0\rangle &= \sum_{\mu} (2\mu 2 - \mu | 0\, 0) \langle S,\, S_z | [\boldsymbol{\sigma}_1 \otimes \boldsymbol{\sigma}_s]^{(2)}_{\mu} | 0,\, 0\rangle \, [\hat{\boldsymbol{r}} \otimes \hat{\boldsymbol{r}}]^{(2)}_{-\mu}, \\
&= \sum_{\mu} (2\mu 2 - \mu | 0\, 0)(0\, 0\, 2\mu | S\, S_z) \langle S || [\boldsymbol{\sigma}_1 \otimes \boldsymbol{\sigma}_s]^{(2)} || 0\rangle \, [\hat{\boldsymbol{r}} \otimes \hat{\boldsymbol{r}}]^{(2)}_{-\mu}.
\end{aligned}$$

ところが, 角運動量 0 と 2 の状態を合成して角運動量 1 や 0 の状態を作ることはできないから, $(0\, 0\, 2\mu | 1\, S_z) = (0\, 0\, 2\mu | 0\, 0) = 0$. よって, $\langle 1\, S_z | S_{12} | 0,\, 0\rangle = \langle 0\, 0 | S_{12} | 0,\, 0\rangle = 0$.