新世紀の量子力学演習　　（川村）

第１章　古典物理学の限界

A　黒体放射

1. ⋆ Boltzmann の原理と量子仮説を使って、Planck の公式
$$u(\nu,T)d\nu=\frac{8\pi h}{c^3}\frac{\nu^3}{e^{\frac{h\nu}{kT}}-1}d\nu$$
を導け。
ただし、$h=6.63\times10^{-34}$J·s は Planck 定数、$k=1.38\times10^{-23}$J·K^{-1} は Boltzmann 定数、$u(\nu,T)$ は 絶対温度 T、振動数 ν の熱放射波のエネルギー密度、$c=3\times10^8$m s^{-1} は光速度である。

2. Planck の公式は、長波長領域（$\lambda=c/\nu\to$ 大）で Rayleigh-Jeans の公式
$$u(\nu,T)d\nu=\frac{8\pi\nu^2}{c^3}kTd\nu$$
（この公式は熱平衡状態におけるエネルギー等配分の法則を使って導くことができる。）短波長領域（$\lambda=c/\nu\to$ 小）で Wien の公式
$$u(\nu,T)d\nu=\frac{8\pi h\nu^3}{c^3}e^{-\frac{h\nu}{kT}}d\nu$$
に近づくことを示せ。（これらの公式は断熱不変量 E/ν と ν/T の間に成立する関係式の一種とみなすことができる。）

3. 波長 $\lambda=6000$Å の電波が出力 100W で放射されているとする。
   (a) 放射される光子のエネルギーは何 J か？　また何 eV か？
   (b) １秒間に放射される光子の数はいくらか？　また１周期の間に放射される光子の数はいくらか？

4. ⋆ 次式を示せ。

$$\epsilon(\nu,T)=\frac{c}{4}u(\nu,T)$$

ここで、$\epsilon(\nu,T)$ は、温度 T の表面の単位面積から、半空間に単位時間に放射される振動数 ν の放射波のエネルギーとする。
次に、Planck の公式と積分公式 $\int_0^\infty \frac{x^3}{e^x-1}dx=\frac{\pi^4}{15}$ を使って、黒体から単位面積、単位時間に放射されるあらゆる振動数にわたるエネルギーの総和 $U(T)$ に関する次の公式を導け。

$$U(T)=\sigma T^4$$

上の関係は、Stefan-Boltzmann の法則と呼ばれている。ここで、

$$\sigma\equiv\frac{2\pi^5k^4}{15c^2h^3}=5.67\times10^{-8}\mathrm{W}\cdot\mathrm{m}^{-2}\cdot\mathrm{K}^{-4}$$

5. ⋆ 絶対温度が T、波長が λ の熱放射波のエネルギー密度 $\tilde{u}(\lambda,T)$ に関する Planck の公式は次式で与えられることを示せ。

$$\tilde{u}(\lambda,T)d\lambda=\frac{8\pi hc}{\lambda^5}\frac{1}{e^{\frac{hc}{kT\lambda}}-1}d\lambda$$

また、上式を使って単位波長間隔当たりのエネルギーが最大になる波長 λ_{max} に関する次の公式を導け。

$$\lambda_{\mathrm{max}}T=b$$

上の関係式は、Wien の変位則と呼ばれている。ここで、

$$b\equiv\frac{hc}{4.965k}=2.9\times10^{-3}\mathrm{m}\cdot\mathrm{K}$$

である。(4.965 は方程式 $(1-\frac{x}{5})e^x=1$ の近似解)

6. 太陽は黒体として光を放出しているものとする。Stefan-Boltzmann の法則と Wien の変位則と次の数値を用いて、太陽の表面温度及び $\lambda_{\max}$ を推定せよ。
   $R_\odot = 7 \times 10^8$ m; 太陽半径
   $d_\odot = 1.5 \times 10^{11}$ m; 太陽と地球との間の距離
   $C_\odot = 1.4 \times 10^3$ J $\cdot$ m^{-2} $\cdot$ s^{-1}; 太陽定数（太陽が我々の真上に来たとき降り注ぐ単位面積、単位時間当たりのエネルギー）

7. 宇宙は、3K の黒体放射で満たされている。（Penzias と Wilson の発見）このとき $\lambda_{\max}$ と光子のエネルギー $(E = h\nu = hc/\lambda)$ を求めよ。

B 光電効果

8. 光電効果とは何か？　簡単に説明せよ。また、次の問に答えよ。
   金属 A に対して光電子を放出させるのに必要な光子のエネルギーは 2.0eV であるとする。波長 2000Å の光を当てたときの光電子の最大エネルギーは何 eV か？

C コンプトン効果

9. * 静止している電子に対して、波長 λ_0、エネルギー E_0、運動量 $\vec{p_0}$ の光子が衝突して、光子は、波長 $\lambda = \lambda_0 + \Delta\lambda$、エネルギー E、運動量 $\vec{p}$ の状態で入射方向に対して角度 θ の方向に散乱され、電子は運動エネルギー K、運動量 $\vec{p_e}$ を持って角度 $-\phi$ の方向にはじかれたとする。以下の公式を導け。

   (a)　$\Delta\lambda \equiv \lambda - \lambda_0 = \lambda_c(1 - \cos\theta)$

$$\lambda_c \equiv \frac{h}{m_e c} = 2.43 \times 10^{-12}\mathrm{m} = 0.0243\text{Å}$$

$$(b) \quad \cot\frac{\theta}{2} = (1 + \frac{h\nu_0}{m_e c^2})\tan\phi \quad , \quad \nu_0 \equiv \frac{c}{\lambda_0}$$

$$(c) \quad \frac{K}{E_0} = \frac{\frac{2h\nu_0}{m_e c^2}\sin^2\frac{\theta}{2}}{1 + \frac{2h\nu_0}{m_e c^2}\sin^2\frac{\theta}{2}}$$

ここで、$m_e = 0.511$ MeV/c$^2 = 9.109 \times 10^{-31}$ kg は電子の質量である。

D 物質波

10. 次の物体 (?) の de Broglie 波長を求めよ。

    (a) 100m を 10.00s で走り抜けようとしている体重 72kg の陸上選手

    (b) ピッチャーが投げた 155km/hour のボール（硬球の重さは 145g）

    (c) 速度 10^6m/s の金属中の自由電子

11. 運動エネルギー K をもつ質量 m の粒子の de Broglie 波長を非相対論的な場合と相対論的な場合について求めよ。

E ボーアの原子理論

12. 電荷密度 ρ の正電荷が一様に分布している球の中に、$-e$ の電子が存在していると仮定しよう。（Thomson の水素原子）

    (a) 電子の運動は、球の動径方向に関して調和振動になることを示せ。

    (b) 全正電荷 $e = 1.6 \times 10^{-19}$C、球の半径 $R = 1.0 \times 10^{-10}$m の時、調和振動の振動数はいくらになるか求めよ。

13. ボーアの水素原子の理論について以下の問に答えよ。必要に応じて、次の数値を使用せよ。$k_0 = \dfrac{1}{4\pi\epsilon_0} = 9.0\times10^9\ \mathrm{N\cdot m^2/C^2}$、$1\mathrm{eV} = 1.6\times10^{-19}\mathrm{J}$、電子の質量 $m = 9.1\times10^{-31}$ kg、電気素量 $e = 1.6\times10^{-19}$ C、プランク定数 $h = 6.6\times10^{-34}$ J · s、光の速さ $c = 3.0\times10^8$ m/s

(1) 電子は飛び飛びのある定まったエネルギーを持った状態にある場合、電磁波を放射せずに安定に存在する。この状態を定常状態という。電子が陽子の回りを速さ v で半径 r の円運動をする際、電子の運動が力学的に安定であるための条件は、

$$k_0\frac{e^2}{r^2} = \frac{mv^2}{r}$$

で与えられる。また、力は中心力であるから電子の軌道角運動量の大きさ $L = mvr$ は一定である。L に関してボーアは次のような条件を課した。

$$L = n\frac{h}{2\pi} \qquad (n = 1, 2, \cdots)$$

n 番目の定常状態における電子の速さ v_n、軌道半径 r_n およびエネルギー E_n に関する以下の公式を導け。

$$\begin{aligned} v_n &= \frac{2\pi k_0 e^2}{hn} \ , \qquad r_n = \frac{h^2}{4\pi^2 k_0 e^2 m} n^2 \ , \\ E_n &= -\frac{2\pi^2 k_0^2 e^4 m}{h^2 n^2} \end{aligned}$$

(2) 1 番目の定常状態に関する軌道半径 r_1[m] の値およびエネルギー E_1[eV] の値を求めよ。r_1 はボーア半径 r_B と呼ばれている。
また、r_B を古典電子半径 $r_e \equiv \dfrac{k_0 e^2}{mc^2} = 2.82\times10^{-15}$m と微細構造定数 $\alpha \equiv \dfrac{k_0 e^2}{\hbar c} \cong \dfrac{1}{137}$ を用いて表せ。

(3) 次の式で与えられる電子のコンプトン波長 λ_e[m] の値および $2\pi r_B$ と λ_e の比 R が $1/\alpha$ になることを示せ。

$$\lambda_e = \frac{h}{mc} \quad , \qquad R \equiv \frac{2\pi r_B}{\lambda_e}$$

(4) v_n, r_n, E_n を α, m, c, r_e, n を使って書き表せ。

(5) 電子に対して次の値を求めよ。($\hbar \equiv \dfrac{h}{2\pi}$)

$$mc, \qquad mc^2, \qquad \frac{\hbar}{mc}, \qquad \frac{\hbar}{mc^2}$$

(6) Rydberg 定数 $R_\infty \equiv \dfrac{k_0^2 e^4 m}{4\pi\hbar^3 c} = 1.097 \times 10^7\ \mathrm{m}^{-1}$ を用いて、E_n に関する公式を書き直せ。Bohr の理論によれば、放出される光の振動数は、

$$\nu = \frac{E_i - E_f}{h} = \frac{k_0^2 e^4 m}{4\pi\hbar^3}\left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2}\right)$$

で与えられる。Rydberg 定数を用いて、$1/\lambda$ に関する公式を求めよ。

新世紀の量子力学演習　（川村）

第２章　波束と不確定性関係

14. 波束

$$f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} g(k) e^{ikx} dk$$

$$g(k) = \begin{cases} 0 & (k < -K, \quad K < k) \\ N & (-K < k < K) \end{cases}$$

について、次の問に答えよ。（N は実数）

(a) $f(x)$ を求めよ。

(b) 規格化条件 $\int_{-\infty}^{\infty} \mid f(x) \mid^2 dx = 1$ を満たす N の値を求めよ。

(c) x、k の幅 Δx、Δk について、関係式 $\Delta x \Delta k > 1$ を導け。ここで、$\Delta x = 2\pi/K$ とする。

15. $\star$ 波束

$$f(x,t) = \int_{-\infty}^{\infty} g(k) e^{i(kx - \omega(k)t)} dk \quad , \qquad g(k) = e^{-\alpha(k-k_0)^2}$$

について次の問に答えよ。

波束が k 空間において $k = k_0$ のまわりに鋭く局在しているとき（$\alpha \to$ 大）、２次までの近似で、$\beta \equiv \frac{1}{2}\left(\frac{d^2\omega}{dk^2}\right)_{k=k_0}$ とおいて、k 空間の積分を実行して、$f(x,t)$ を求めよ。また、絶対値の２乗を計算して、波束のピークは、群速度 $v_g = \left(\frac{d\omega}{dk}\right)_{k=k_0}$ で伝播することおよび波束が時間とともに拡がっていくことを示せ。

16. 波束

$$f(x,t)=\int_{-\infty}^{\infty}g(k)e^{i(kx-\omega(k)t)}dk$$

は運動量 p、運動エネルギー $E=\dfrac{p^2}{2m}$ を持った粒子を記述しているとする。量子仮説 $E=\hbar\omega$ および $p=\hbar k$ を使って以下の関係式を導け。

$$\omega=\frac{p^2}{2m\hbar}\quad,\quad v_g\equiv\frac{d\omega}{dk}=\frac{p}{m}$$

量子仮説を使うと波束は

$$\psi(x,t)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty}\phi(p)e^{i(px-Et)/\hbar}dp$$

と表わすことができる。$\psi(x,t)$ が次の微分方程式を満たすことを示せ。

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t)=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x,t)$$

17. ハイゼンベルクの不確定性関係を思考実験を使って説明せよ。

18. 不確定性関係 $\Delta r\Delta p\sim\hbar$ を用いて

$$H=\frac{p^2}{2m}-k_0\frac{e^2}{r}$$

で記述される水素原子の基底状態のエネルギーを評価せよ。

19. 不確定性関係 $\Delta x\Delta p\sim\hbar/2$ を用いて

$$H=\frac{p^2}{2m}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2$$

で記述される 1 次元調和振動子の基底状態のエネルギーを評価せよ。

20. 湯川の中間子論によると、核力は核子間でパイ中間子と呼ばれる量子が行き来することによって生じる。不確定性関係 $\Delta E\Delta t\sim\hbar$ を用いてパイ中間子の質量 m_π を概算せよ。核力の到達範囲は $r_0(\sim c\Delta t)=1.4\times10^{-15}\mathrm{m}$ とする。質量の単位は、$\mathrm{MeV/c^2}$ を使え。

新世紀の量子力学演習　　（川村）

第３章　シュレディンガー方程式

21. ⋆ Schrödinger 方程式

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{r},t)=\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\triangle+V(\vec{r})\right)\psi(\vec{r},t)$$

に関して、以下の問に答えよ。 ここで、$\triangle\equiv\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}$

(a) 確率保存の式

$$\frac{\partial\rho}{\partial t}+\vec{\nabla}\cdot\vec{J}=0$$

を導け。ここで、ρ は確率密度、$\vec{J}$ は確率の流れ密度で次のように定義される。

$$\rho\equiv\psi^*\psi=|\psi|^2 \qquad \vec{J}\equiv-\frac{i\hbar}{2m}[\psi^*(\vec{\nabla}\psi)-(\vec{\nabla}\psi)^*\psi]$$

(b) 時刻 $t=0$ で規格化された波動関数 $\psi(\vec{r},t)$ はその後の任意の時刻において規格化が保たれていることを示せ。

22. 次の波動関数に対して確率密度と確率の流れ密度を求めよ。
(a) $\psi(\vec{r},t)=a\exp[\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\cdot\vec{r}-Et)]$　　(b) $\psi(r,t)=\frac{a}{r}\exp[\frac{i}{\hbar}(pr-Et)]$

23. ⋆ 粒子を記述する波導関数 $\psi(\vec{r},t)$ は Schrödinger 方程式を満足するとする。粒子がポテンシャル $V(\vec{r})$ の影響を受けて運動するとき、粒子の位置と運動量の平均値について次のような（古典論と同じ形の）運動方程式が成り立つことを示せ。（Ehrenfest の定理）

$$\frac{d\langle\vec{r}\rangle}{dt}=\frac{\langle\vec{p}\rangle}{m} \qquad \frac{d\langle\vec{p}\rangle}{dt}=-\langle\vec{\nabla}V\rangle$$

ここで、$\langle A\rangle\equiv\int\psi^*(\vec{r},t)A\psi(\vec{r},t)d^3x$

24. 波動関数 $\psi(x) = \left(\frac{\pi}{\alpha}\right)^{-\frac{1}{4}} \exp\left(-\frac{\alpha x^2}{2}\right)$ について次の量を計算せよ。ここで、α は実数とする。

(a) $\langle x \rangle \quad , \quad \langle x^2 \rangle \quad , \quad \Delta x \equiv \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2}$

(b) $\langle p \rangle \quad , \quad \langle p^2 \rangle \quad , \quad \Delta p \equiv \sqrt{\langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2}$

(c) $\Delta x \Delta p$

25. 波動関数 $\psi(x) = \sqrt{\frac{2a^3}{\pi}} \frac{1}{x^2 + a^2}$ について次の問に答えよ。ここで、a は実数とする。必要ならば、公式 $\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{x^2 + a^2} = \frac{\pi}{\sqrt{a^2}}$ を使え。

(a) $\langle x \rangle \quad , \quad \langle x^2 \rangle \quad , \quad \Delta x \equiv \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2}$

(b) $\langle p \rangle \quad , \quad \langle p^2 \rangle \quad , \quad \Delta p \equiv \sqrt{\langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2}$

(c) $\Delta x \Delta p$

26. 角変数 $\theta(-\pi \leq \theta \leq \pi)$ の関数 $\psi(\theta)$ について、境界条件 $\psi(\pi) = \psi(-\pi)$ が満足されるとき、演算子 $L = -i\hbar \frac{d}{d\theta}$ は、実数の期待値を持つことを示せ。

27. $\phi(p)$ は $\psi(x)$ から次のフーリエ変換によって得られる関数とする。

$$\phi(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x) e^{-ipx/\hbar} dx$$

次の関係式を示せ。

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) x \psi(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} \phi^*(p) i\hbar \frac{d}{dp} \phi(p) dp$$

$$\langle p \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \phi^*(p) p \phi(p) dp = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \psi(x) dx$$

28. 量子力学において運動量 p と位置 x は演算子で交換関係 $[x,p]=i\hbar$ を満たす。次の関係式を示せ。

$$e^{ipa/\hbar}xe^{-ipa/\hbar}=x+a$$

ここで、演算子 e^A の定義は $e^A \equiv \sum_{n=0}^{\infty}\frac{A^n}{n!}$ である。

29. $\diamondsuit$ Schrödinger 方程式

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t)=\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+V(x)\right)\psi(x,t)$$

の解 $\psi(x,t)$ は次の公式で与えられることを示せ。

$$\psi(x,t)=(\frac{2\pi i\hbar\epsilon}{m})^{-\frac{1}{2}}\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left[\frac{i}{\hbar}\left(\frac{1}{2}m\frac{(x-x')^2}{\epsilon}-V(x)\epsilon\right)\right]\psi(x',t_0)dx'$$

ここで、$\epsilon\equiv t-t_0$ は微小量とする。（波動現象に現われるホイヘンスの原理の１例である。）

30. $\diamondsuit$ 運動量 p、運動エネルギー E、$(E^2=p^2c^2+m^2c^4)$ を持った相対論的粒子に関する波束

$$\psi(x,t)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty}\phi(p)e^{i(px-Et)/\hbar}dp$$

について、$\psi(x,t)$ は次の微分方程式を満たすことを示せ。

$$\left(\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}-\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right)\psi(x,t)+\left(\frac{mc}{\hbar}\right)^2\psi(x,t)=0$$

次に、保存則

$$\frac{\partial\rho}{\partial t}+\frac{\partial J}{\partial x}=0$$

を満足する ρ を導け。ここで、J は次のように定義されている。

$$J\equiv-\frac{i\hbar}{2m}\left(\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x}-\frac{\partial\psi^*}{\partial x}\psi\right)$$

ρ は確率密度として解釈することは可能か？

新世紀の量子力学演習　（川村）

第４章　固有関数と固有値

31. 時間に依存した Schrödinger 方程式

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x,t) + V(x)\psi(x,t)$$

について、変数分離 $\psi(x,t) = T(t)\phi(x)$ を使って、$\phi(x)$ に関する時間に依存しない Schrödinger 方程式を導け。

32. 次に挙げる演算子の中から、線形演算子を選び出せ。

$$\begin{array}{llll} a) & O_1\psi(x) = x^3\psi(x) & b) & O_2\psi(x) = x\dfrac{d}{dx}\psi(x) \\ c) & O_3\psi(x) = \lambda\psi^*(x) & d) & O_4\psi(x) = \exp(\psi(x)) \\ e) & O_5\psi(x) = \dfrac{d}{dx}\psi(x) + a & f) & O_6\psi(x) = \displaystyle\int_{-\infty}^{x}\psi(x')x'dx' \end{array}$$

33. 上に挙げた演算子に関して、次の問に答えよ。

(a) 固有値方程式 $O_6\psi(x) = \lambda\psi(x)$ を解いて、２乗積分可能な固有関数を求めよ。

(b) 次の交換関係を計算せよ。

$$(1)\quad [O_1, O_2]\ , \qquad\qquad (2)\quad [O_2, O_6]$$

34. ⋆ １次元の箱 $(-a < x < a)$ の中に質量 m の自由粒子が存在しているとする。つまり、ポテンシャルが

$$\begin{aligned} V(x) &= 0 \qquad\qquad (|\,x\,| < a) \\ &= \infty \qquad\qquad (|\,x\,| > a) \end{aligned}$$

で与えられている時、エネルギーの固有値と規格化された固有関数を求めよ。また、粒子は電子であるとし、$a = 1 \times 10^{-14}$m の時、基底状態のエネルギーの値 [J] を求めよ。

また、第 n 番目の励起状態に対応する固有関数を使って、次の物理量の期待値を求めよ。

(a) x , p

(b) $\Delta x \equiv \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2}$, $\Delta p \equiv \sqrt{\langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2}$

(c) 基底状態について、$\Delta x \Delta p$

35. * 次のようなポテンシャルの中に存在する粒子の束縛状態のエネルギーを求めよ。

$$\begin{aligned} V(x) &= 0 & (\mid x \mid < a) \\ &= V_0 & (\mid x \mid > a) \end{aligned}$$

ただし、V_0 は正の定数とする。

36. * 波動関数が、

$$\begin{aligned} \psi(x) &= 1 & (\mid x \mid < a) \\ &= 0 & (\mid x \mid > a) \end{aligned}$$

で与えられる量子状態にある粒子について運動量を測定する時、p と $p + dp$ の間に見出される確率を求めよ。

37. $P\psi(x) = \psi(-x)$ によって定義されるパリティ演算子 P がエルミート演算子であることを示せ。また、パリティ演算子 P の固有値 +1 と −1 に対応する固有関数は互いに直交することを示せ。

新世紀の量子力学演習 （川村）

第５章　１次元ポテンシャル

38. １次元の Schrödinger 方程式に関して以下の問に答えよ。

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi(x)+V(x)\psi(x)=E\psi(x)$$

(a) 離散的なスペクトラムを持つ場合、エネルギー準位は縮退していないことを示せ。

(b) ポテンシャルが $V(x)=V(-x)$ を満たすとき、定常な束縛状態の波動関数は $\psi(x)=\psi(-x)$ か $\psi(x)=-\psi(-x)$ のどちらかであることを示せ。

(c) ポテンシャル $V(x)$ が $x=x_1$ で有限の不連続性を持ったとしても、波動関数の１階微分 $d\psi(x)/dx$ と波動関数 $\psi(x)$ は連続であることを示せ。

39. 階段型ポテンシャル

$$\begin{aligned} V(x) &= 0 && (x<0) \\ &= V_0 && (x>0) \end{aligned}$$

に対して、エネルギー E、質量 m の粒子が x の負の方向から入射したとき、反射率 R と透過率 T を次の２つの場合に分けて求めよ。

(a) $V_0<E$　　(b) $0<E<V_0$

40. 井戸型ポテンシャル

$$\begin{aligned} V(x) &= 0 && (\mid x \mid > a) \\ &= -V_0 && (\mid x \mid < a) \end{aligned}$$

に対して、エネルギー E、質量 m の粒子が x の負の方向から入射したとき、反射率 R と透過率 T を求めよ。ただし、$E>0$ とする。

41. * エネルギー E、質量 m の粒子が、ポテンシャルの障壁

$$
\begin{aligned}
V(x) &= 0 \qquad\qquad && (x < 0, a < x) \\
&= V_0 && (0 < x < a)
\end{aligned}
$$

に x の負の方向から入射したとする。

(a) $V_0 < E$ の時の反射率 R と透過率 T を求めよ。

(b) $0 < E < V_0$ の時の反射率 R と透過率 T を求めよ。

(c) $V_0 - E \gg \hbar^2/2ma^2$ の時の透過率 T の近似式を求めよ。（透過率 T は $V_0 - E$ や障壁の幅 a が増加するとともに急速に減少する。）

42. 任意の１次元ポテンシャルによる障壁が存在する場合、反射率 R と透過率 T の間に $R + T = 1$ という関係が成り立つことを示せ。

43. * x 軸上で原点からの距離に比例する引力を受けて単振動している質量 m の量子力学的な粒子に関するエネルギー固有値及び固有関数を求めよ。解くべき固有値方程式は

$$
-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \psi(x) = E\psi(x)
$$

44. 上で得られた第 n 番目の励起状態に対応する固有関数を使って、次の問に答えよ。

(a) $\langle x^2 \rangle$ と $\langle p^2 \rangle$ を求めよ。

(b) 運動エネルギー $K = \dfrac{p^2}{2m}$ とポテンシャルエネルギー $V = \dfrac{1}{2}m\omega^2 x^2$ の期待値が等しいことを示せ。

(c) 不確定性関係 $\Delta x \Delta p \geq \hbar/2$ を示せ。

45. $^\diamond$ １次元の空間の限られた領域を運動する粒子の運動エネルギー K と位置エネルギー V の平均値の間には、一般に次の関係式が成り立つ。

$$
\lim_{T\to\infty} \frac{1}{T}\int_0^T 2\langle K \rangle dt = \lim_{T\to\infty} \frac{1}{T}\int_0^T \langle x\frac{d}{dx}V \rangle dt \qquad \text{（ビリアル定理）}
$$

ここで、$\langle\hat{O}\rangle \equiv \int \psi^*(x,t)\hat{O}\psi(x,t)dx$

$K = \dfrac{p^2}{2m}$ の場合に、上の関係式を示せ。また、定常状態に対しては、

$$2\langle K\rangle = \langle x\frac{d}{dx}V\rangle$$

が成り立つことを示せ。

46. ポテンシャル $-U_0\delta(x)$ (U_0 は正の定数) が働くとき、質量 m の粒子の束縛状態のエネルギーを求めよ。

47. １次元の周期的なポテンシャル $V(x)$(周期 a、$V(x) = V(x+a)$) に関して、以下の問に答えよ。

    (a) 演算子 $U \equiv \exp(ipa/\hbar)$ は、次のような平行移動を引き起こす演算子であることを示せ。

    $$U\psi(x) = \psi(x+a)$$

    (b) U は $H = \dfrac{p^2}{2m} + V(x)$ と可換であることを示せ。

    (c) $\psi(x+a) = e^{i\theta}\psi(x)$ を示せ。ここで、θ は実数。また、周期関数 $u(x)$ ($u(x+a) = u(x)$) を使って、$\psi(x)$ は $\psi(x) = e^{ikx}u(x)$ と表わすことができる。ここで、$ka = \theta$（ブロッホの定理)。

48. $\diamondsuit$ 次のような１次元の周期的なポテンシャル $V(x)$ の中を運動する質量 m の粒子に対して、許されるエネルギー領域（エネルギー・バンド）を求めよ。

$$V(x) = \frac{\hbar^2\gamma}{ma}\sum_{n=-\infty}^{\infty}\delta(x+na)$$

ここで、a は格子間隔、γ は正の無次元の定数である。

新世紀の量子力学演習　（川村）

第６章　波動力学の一般的構造

時刻 t における状態 $\psi(\vec{x},t)$ において、演算子 $\hat{A}$ の期待値は次で与えられる。

$$\langle A \rangle \equiv \int \psi^* \hat{A} \psi d^3x$$

$\hat{A}$ が物理量 A に対応する演算子ならば、その期待値は実数であり、次の関係が成立する。

$$\int \psi^* \hat{A} \psi d^3x = \int (\hat{A}\psi)^* \psi d^3x$$

このような性質をもつ演算子はエルミート演算子と呼ばれている。

49. $\vec{p} = -i\hbar\vec{\nabla}$ および $\hat{H} = -\dfrac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2 + V(\vec{x})$ はエルミート演算子であることを示せ。ただし、無限遠点で ψ が十分速く 0 に近づくとする。

50. $\hat{A}$ はエルミート演算子とする。2乗積分可能な任意の関数 ψ_1 と ψ_2 に関して、次の公式が成り立つことを示せ。

$$\int \psi_2^* \hat{A} \psi_1 d^3x = \int (\hat{A}\psi_2)^* \psi_1 d^3x$$

51. $\star$ エルミート演算子 $\hat{A}$ および $\hat{B}$ が交換関係 $[\hat{A},\hat{B}] = i\hat{C}$ を満足する時、以下の問に答えよ。

    (a) $\hat{C} = \hat{C}^\dagger$ を示せ。

    (b) $\Delta A \Delta B \geq |\langle C \rangle|/2$ を示せ。
    ここで、 $(\Delta A)^2 \equiv \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2$、$(\Delta B)^2 \equiv \langle B^2 \rangle - \langle B \rangle^2$

(c) 上の不等式において、等号が成り立つための条件は、$(\hat{A}-\langle A\rangle)\psi = i\alpha((\hat{B}-\langle B\rangle)\psi$ となる実数 α が存在することである。α を求めよ。

52. エルミート演算子 $\hat{A}$ に関して、次の問に答えよ。

(a) $\hat{A}$ の固有値は実数であることを示せ。

(b) 異なる固有値に対する固有関数は互いに直交することを示せ。

53. $\star$ 演算子 $\hat{A}$ および $\hat{B}$ に関する次の定理を示せ。

(a) （定理）物理量 A および B が同時に定まった値をとるならば、対応する演算子 $\hat{A}$ および $\hat{B}$ は可換である。

(b) （定理）エルミート演算子 $\hat{A}$ および $\hat{B}$ が可換である時、共通の固有関数のセットを選ぶことができる。

54. 次で与えられる波動関数の運動量に関する期待値を求めよ。ただし、波動関数は束縛状態を表し、規格化されているものとする。

(1) 実関数の波動関数$\psi(x)$, (2) $\psi(x)=\phi(x)e^{ikx}$ ($\phi(x)$ は実関数)

(3) ハミルトニアン$\hat{H}=\frac{1}{2m}\vec{p}^2+V(\vec{x})$ の固有関数

55. 演算子 $\hat{A}$ に関する次の運動方程式を導け。

$$\frac{d}{dt}\langle A\rangle = \langle\frac{\partial A}{\partial t}\rangle + \frac{i}{\hbar}\langle[H,A]\rangle$$

56. δ 関数について、次の公式を示せ。

(1) $\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\delta(x)dx = f(0), \quad \int_{-\infty}^{\infty} f(x)\delta(x-a)dx = f(a)$

(2) $\delta(-x)=\delta(x)$ (3) $x\delta(x)=0$ (4) $\delta(ax)=\frac{\delta(x)}{a}, \quad (a>0)$

(5) $\delta(a^2-x^2)=\frac{1}{2a}(\delta(x-a)+\delta(x+a)), \quad (a>0)$

(6) $\int_{-\infty}^{\infty}\phi(x)\frac{d}{dx}\delta(x)dx = -\frac{d}{dx}\phi(0)$

新世紀の量子力学演習　（川村）

第７章　量子力学における演算子法

１次元調和振動子のハミルトニアン $\hat{H}$ は、次で与えられる。

$$\hat{H} \;=\; \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2$$

ここで、演算子 $\hat{x}$ と $\hat{p}$ は正準交換関係 $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$ を満たす。以下の問 57–64 に答えよ。

57. 次で定義される演算子 $\hat{a}$ および $\hat{a}^\dagger$ が交換関係 $[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1$ を満たすことを示せ。

$$\hat{a} \equiv \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(\hat{x} + \frac{i\hat{p}}{m\omega}\right), \qquad \hat{a}^\dagger \equiv \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(\hat{x} - \frac{i\hat{p}}{m\omega}\right)$$

また、$\hat{H}$ が次の形に書き表せることを示せ。

$$\hat{H} = \hbar\omega(\hat{N} + \frac{1}{2})$$

ここで、$\hat{N}(\equiv \hat{a}^\dagger\hat{a})$ は個数演算子。

58. $\hat{H}$ の固有値 E_n および規格化された固有ベクトル $|u_n\rangle$ はそれぞれ次の式で与えられる。

$$E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2}), \qquad |u_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}(a^\dagger)^n|u_0\rangle, \quad (n = 0, 1, 2, \ldots)$$

ここで、$|u_0\rangle$ は基底状態を表わす規格化されたベクトルで $\hat{a}|u_0\rangle = 0$ を満たす。演算子 $\hat{a}$ および $\hat{a}^\dagger$ が次の性質を満たすことを示せ。

$$\hat{a}|u_n\rangle = \sqrt{n}|u_{n-1}\rangle, \qquad \hat{a}^\dagger|u_n\rangle = \sqrt{n+1}|u_{n+1}\rangle$$
$$\langle u_m|u_n\rangle = \delta_{mn}$$

また、$|u_n\rangle$ が $\hat{H}$ の固有値 E_n の固有状態 $(\hat{H}|u_n\rangle = E_n|u_n\rangle)$ であることを示せ。

59. 位置表示での波動関数 $\psi_n(x)$ と $\hat{H}$ の固有ベクトル $|u_n\rangle$ との間の対応関係は $\psi_n(x) = \langle x|u_n\rangle$ で与えられる。問 57,58 の中の関係式を使って、$\psi_n(x)$ が問 43 で解いた１次元調和振動子に関する Schrödinger 方程式

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2\psi(x) = E\psi(x)$$

の第 n 番目の励起状態に関する固有関数であることを示せ。

60. 以下の量を計算せよ。

(a) $\langle u_n|\hat{x}|u_m\rangle$, (b) $\langle u_n|\hat{p}|u_m\rangle$, (c) $\langle u_n|[\hat{x},\hat{p}]|u_m\rangle$

(d) $\Delta x \equiv \sqrt{\langle u_n|\hat{x}^2|u_n\rangle - \langle u_n|\hat{x}|u_n\rangle^2}$

(e) $\Delta p \equiv \sqrt{\langle u_n|\hat{p}^2|u_n\rangle - \langle u_n|\hat{p}|u_n\rangle^2}$

61. 次の関係式を示せ。

$$(1) \quad e^{\lambda\hat{a}^\dagger} f(\hat{a}) e^{-\lambda\hat{a}^\dagger} = f(\hat{a} - \lambda), \quad (2) \quad e^{\alpha\hat{a} + \beta\hat{a}^\dagger} = e^{\beta\hat{a}^\dagger} e^{\alpha\hat{a}} e^{\frac{\alpha\beta}{2}}$$

ここで、λ、α、β は定数

62. $\hat{x}$ と $\hat{p}$ は $\hat{a}$ および $\hat{a}^\dagger$ を使って次のように書き表せる。

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\hat{a} + \hat{a}^\dagger), \qquad \hat{p} = \frac{1}{i}\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}(\hat{a} - \hat{a}^\dagger)$$

前問の結果を使って、

$$e^{ik\hat{x}} = \exp\left(ik\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\hat{a}^\dagger\right)\exp\left(ik\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\hat{a}\right)\exp\left(-\frac{\hbar k^2}{4m\omega}\right)$$

を示せ。また、この表式を用いて $< u_0|e^{ik\hat{x}}|u_0 >$ を計算せよ。

63. * Schrödinger 描像と Heisenberg 描像について紹介せよ。また、Heisenberg 描像において、演算子 $\hat{a}$ および $\hat{a}^\dagger$ の時間発展を求めよ。

64. $\diamondsuit$ $|\alpha\rangle$ を演算子 $\hat{a}$ に関する固有値 α の規格化された固有状態ベクトルとする。すなわち、$\hat{a}|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle$、$\langle\alpha|\alpha\rangle = 1$ とする。以下の問に答えよ。

(a) 次の公式で与えられた $|\alpha\rangle$ が $\hat{a}|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle$ および $\langle\alpha|\alpha\rangle = 1$ を満たすことを示せ。

$$\begin{aligned}
|\alpha\rangle &= \exp\left(-\frac{1}{2}|\alpha|^2\right)\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}|u_n\rangle \\
&= \exp\left(-\frac{1}{2}|\alpha|^2\right)\exp(\alpha\hat{a}^\dagger)|u_0\rangle \\
&= \exp(\alpha\hat{a}^\dagger - \alpha^*\hat{a})|u_0\rangle
\end{aligned}$$

(b) 状態 $|\alpha\rangle$ に対して、粒子数の期待値 $\langle N\rangle \equiv \langle\alpha|\hat{N}|\alpha\rangle$ を求めよ。また、状態 $|\alpha\rangle$ において、粒子数が n である確率 $P_n = |\langle u_n|\alpha\rangle|^2$ を計算し、P_n を $\langle N\rangle$ の関数として表わせ。(P_n は Poisson 分布に従う。)

(c) 状態 $|\alpha\rangle$ は、物理量 $\hat{x}$ と $\hat{p}$ のゆらぎの積が最小になる状態 ($\Delta x\Delta p = \hbar/2$) であることを示せ。ここで、$\Delta x \equiv \sqrt{\langle\alpha|\hat{x}^2|\alpha\rangle - \langle\alpha|\hat{x}|\alpha\rangle^2}$ および $\Delta p \equiv \sqrt{\langle\alpha|\hat{p}^2|\alpha\rangle - \langle\alpha|\hat{p}|\alpha\rangle^2}$

65. $\diamondsuit$ 次で定義される演算子 $\hat{Q}$ および $\hat{Q}^\dagger$

$$\hat{Q} \equiv \sigma_+\left(-i\frac{d}{dx} - iW(x)\right), \qquad \hat{Q}^\dagger \equiv \sigma_-\left(-i\frac{d}{dx} + iW(x)\right)$$

からハミルトニアン $\hat{H}$ は次のように構成される。

$$\hat{H} \equiv \frac{1}{2}(\hat{Q}\hat{Q}^\dagger + \hat{Q}^\dagger\hat{Q})$$

ここで、σ_+ および σ_- は

$$\sigma_+ = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_- = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

で与えられる。以下の問に答えよ。

(a) $\hat{Q}^2$ および $\hat{Q}^{\dagger 2}$ を計算せよ。また、$\hat{Q}$ および $\hat{Q}^\dagger$ は運動の恒量（保存量）であることを示せ。

(b) $\hat{H}$ の固有値は正またはゼロであることを示せ。

(c) $\hat{H}$ の固有関数 $\psi_B(x)$ は、固有値 $E(>0)$ を持つとする。このとき、関数 $\psi_F(x) = \hat{Q}\psi_B(x)$ もまた $\hat{H}$ の固有関数になることを示せ。また、その固有値を求めよ。ここで、$\psi_B(x)$ は

$$\psi_B(x) = \begin{pmatrix} 0 \\ \phi(x) \end{pmatrix}$$

(d) $\hat{H}$ の定義式を使って、ハミルトニアン $\hat{H}$ を微分演算子の形で具体的に書き下せ。

(e) $W(x) = \lambda x$ の時、エネルギー固有値およびゼロエネルギー状態の固有関数を求めよ。ただし、λ はゼロでない定数とする。

(f) $W(x)$ は区間 $[x_0, x_1]$ で有界で、２階微分 $W''(x)$ は $W(x)$ のゼロ点 x_P $(W(x_P) = 0)$ でゼロでない $(W''(x_P) \neq 0)$ とする。$\psi_B(x)$ 型のゼロエネルギー状態の固有関数の数と $\psi_F(x)$ 型のゼロエネルギー状態の固有関数の数の差は ± 1 あるいは 0 であることを示せ。

66. $^\diamondsuit$ 時刻 t_0 で位置 x' にあった粒子が、時刻 t で位置 x にいる確率振幅は

$$G(x, t; x', t_0) = \langle x| \exp(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t - t_0))|x'\rangle$$

で与えられることを示せ。さらに、空間は１次元として質量 m の自由粒子について $G(x, t; x', t_0)$ を求めよ。$G(x, t; x', t_0)$ は Schrödinger 方程式を満たし、Schrödinger 方程式の解 $\psi(x, t)$ との間に次の関係がある。（問 29 参照）

$$\psi(x, t) = \int G(x, t; x', t_0)\psi(x', t_0)dx'$$

新世紀の量子力学演習　　（川村）

第８章　N 粒子系

67. 「外場がないとき、系全体を平行移動しても、系の物理的性質は変化しない。」という性質から N 粒子系に関するポテンシャルは粒子の相対的な距離にのみ依存する。すなわち、$V(x_1 - x_2, ..., x_{N-1} - x_N)$ で与えられる。このとき、N 粒子系に関する全運動量は保存することを古典力学と量子力学について示せ。

68. 相互作用していない２粒子系の Schrödinger 方程式

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_1}\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} - \frac{\hbar^2}{2m_2}\frac{\partial^2}{\partial x_2^2}\right)u(x_1, x_2) = Eu(x_1, x_2)$$

について、変数分離 $u(x_1, x_2) = \phi_1(x_1)\phi_2(x_2)$ を使って固有関数 $u(x_1, x_2)$ を求めよ。また次で定義される相対座標 x および重心座標 X を使って固有関数を書き直せ。

$$x = x_1 - x_2, \quad X = \frac{m_1 x_1 + m_2 x_2}{m_1 + m_2}$$

69. ２粒子系の Schrödinger 方程式

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_1}\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} - \frac{\hbar^2}{2m_2}\frac{\partial^2}{\partial x_2^2}\right)u(x_1, x_2) \\ + V(x_1 - x_2)u(x_1, x_2) = Eu(x_1, x_2)$$

を、相対座標 x と重心座標 X を使って書き直せ。また、$V(x) = 0$ の時の固有関数を求めよ。

70. 次のようなハミルトニアンで記述される２個の同一粒子系について、

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_1^2}{2m} + \frac{\hat{p}_2^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x_1^2 + \frac{1}{2}m\omega^2 x_2^2$$

重心運動と相対運動に分離して、エネルギー固有値を求めよ。１次元調和振動子のエネルギー固有値は $E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})$ で与えられる。

71. ハミルトニアン

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_1^2}{2m} + \frac{\hat{p}_2^2}{2m} + V(x_1, x_2), \quad V(x_2, x_1) = V(x_1, x_2)$$

で記述される２粒子系ついて、次の問に答えよ。

(a) 粒子１と２を交換する演算子を $\hat{P}_{12}$ とする。$\hat{P}_{12}$ は、運動の恒量（保存量）であることを示せ。

(b) $\hat{P}_{12}$ の固有値を求めよ。

72. * パウリの排他原理について説明せよ。

73. １次元の箱 $(0 \leq x \leq a)$ の中に、２個の相互作用しない電子が存在しているとする。電子の質量は m とする。２個の電子が同じスピン状態にあるとき、基底状態の波動関数とエネルギー固有値を求めよ。また、異なるスピン状態にあるときはどうか？

74. * １次元の箱 $(0 \leq x \leq a)$ の中に、質量 m の N 個の自由な同種粒子が存在しているとする。それぞれの粒子のとりうるエネルギーの固有値は、

$$E_n = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}n^2, \quad (n = 1, 2, 3, ...)$$

である。粒子が Bose 粒子であるとき、基底状態の全エネルギーを求めよ。また、粒子が２つのスピン状態を持った Fermi 粒子であるとき、基底状態の全エネルギー及び１粒子当りのエネルギーを求めよ。ここで、N は十分大きいとして、和を積分に直して計算せよ。Fermi 粒子に関して、満たされるべき最も高いエネルギー準位はフェルミエネルギー E_F と呼ばれている。この問題に関して、E_F を求めよ。

新世紀の量子力学演習　（川村）

第９章　３次元シュレディンガー方程式 I

75. 次に与えられる３次元の球対称なポテンシャルの中に互いに相互作用しない N 個の同種のフェルミ粒子（スピンの自由度２）が存在するとき、基底状態に縮退度がないのは N がどのような値の時か?

$$V(\vec{x}_1, ..., \vec{x}_N) = \sum_{i=1}^{N} \frac{1}{2} m\omega^2 \vec{x}_i^2$$

76. ⋆ 長さ a の３次元の箱の中に多数の自由電子 (質量 m、スピンの自由度２) が存在しているとする。以下の問に答えよ。

    (a) 固有関数とエネルギー固有値を求めよ。

    (b) フェルミエネルギー E_F とは何か？　説明せよ。

    (c) フェルミエネルギー以下に含まれる電子の個数 N はいくらか。

    (d) E_F を電子の個数密度 $n = \frac{N}{a^3}$ を使って表わせ。

    (e) 全エネルギー E_{tot} を N を使って表せ。また、n を使って表せ。（フェルミ球の半径 R は、十分大きいとして和を積分に直して計算せよ。）

    (f) $E_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m}$、$k_F = \frac{2\pi}{\lambda_F}$ で与えられる λ_F と粒子間隔 $d = n^{-1/3}$ の間の関係を求めよ。

77. 銅の中に個数密度 8.5×10^{22} 個/cm^3 の自由電子が存在しているとする。前問に基づいて、以下の問に答えよ。

    (a) フェルミエネルギーは何 eV か。

    (b) フェルミエネルギーと等しい運動エネルギーを持った電子の速さはいくらか。

新世紀の量子力学演習　（川村）

第１０章　3 次元シュレディンガー方程式 II

78. ハミルトニアン $H = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) + V(r)$、$r = (x^2+y^2+z^2)^{1/2}$ は z 軸の回りの θ 回転

$$\begin{cases} x' = x\cos\theta - y\sin\theta \\ y' = x\sin\theta + y\cos\theta \end{cases}$$

のもとで不変であることを示せ。また、固有値方程式 $H\psi(x,y,z) = E\psi(x,y,z)$ と z 軸の回りの無限小回転のもとでの不変性から運動の恒量（保存量）を求めよ。

79. 角運動量演算子 $\vec{L} = (L_x, L_y, L_z)$

$$L_x = -i\hbar\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right), \qquad L_y = -i\hbar\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right)$$
$$L_z = -i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right)$$

について次の問に答えよ。

(a) 次の交換関係を示せ。

$$[L_x, L_y] = i\hbar L_z, \qquad [L_y, L_z] = i\hbar L_x, \qquad [L_z, L_x] = i\hbar L_y$$

(b) $\vec{L}^2$ は、L_x、L_y、L_z のいずれのものとも可換であることを示せ。

(c) L_z は $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) + V(r)$ と可換であることを示せ。

80. 次の関係式を証明せよ。

$$\vec{L}^2 + (\vec{r}\cdot\vec{p})^2 = \vec{r}^{\,2}\vec{p}^{\,2} + i\hbar\vec{r}\cdot\vec{p}$$

また、この関係式を変形することにより次式を導け。

$$\vec{p}^{\,2} = \frac{1}{r^2}\vec{L}^2 - \hbar^2\frac{1}{r^2}\left(r\frac{\partial}{\partial r}\right)^2 - \hbar^2\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}$$

81. ⋆ シュレディンガー方程式

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)+V(x,y,z)\right]\psi(x,y,z) = E\psi(x,y,z)$$

を極座標で書き表すと次のようになる。

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right)\psi(x,y,z) \\ + V(x,y,z)\psi(x,y,z) = E\psi(x,y,z)$$

ポテンシャルが $V = V(r)$ の時、変数分離 $\psi = R_{nlm}(r)Y_{lm}(\theta,\phi)$ をおこなうと、$R_{nlm}(r)$ について次の方程式が導かれる。

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{d^2}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{d}{dr}-\frac{l(l+1)}{r^2}\right)+V(r)\right]R_{nlm}(r) = ER_{nlm}(r)$$

ここで、$Y_{lm}(\theta,\phi)$ に関する固有値方程式において固有値が $l(l+1)\hbar$,($l = 0,1,2,...$) で与えられるという事実を使っている。(次章で証明する。)以下の問に答えよ。ただし、$r\to\infty$ で $r^2V(r)\to 0$ と仮定する。

(a) $u_{nlm}(r) = rR_{nlm}(r)$ とおくことによって、$u_{nlm}(r)$ の満たす方程式を求めよ。

(b) $r = 0$ の近傍における解の漸近形を求めよ。

(c) $r\to\infty$ で $V(r)\to 0$ となる時、解の漸近形を求めよ。

82. 前問に関して自由粒子 $V(r) = 0$ の場合を考察しよう。

(a) 変数変換 $\rho = kr$ を行って $R_{nlm}(r)$ に関する方程式を求めよ。

(b) シュレディンガー方程式の解を求めよ。ただし、原点で正則とする。

(c) $\rho \gg l$ に対して、(b) で得られた解の漸近形を求めよ。

83. 前問の (c) で得られた漸近形をもとにして、波束の保存を使って、$V(r) \neq 0$ の場合について議論せよ。

84. 球対称なポテンシャル $V(r)$ の中での粒子の束縛状態について、与えられた角運動量 l の値に対して許される最低エネルギー固有値 $E_l^{(0)}$ は l の増大とともに大きくなることを示せ。

85. 球対称なポテンシャル
$V(r) = 0 \qquad (r < a), \quad V(r) = \infty \qquad (r > a)$
に束縛されている粒子のエネルギーと波動関数を求めよ。また、特に、$l = 0$ の場合はどうなるか。

86. * 井戸型ポテンシャル
$V(r) = -V_0 \qquad (r < a), \quad V(r) = 0 \qquad (r > a)$
に束縛されている粒子（エネルギー固有値 E が負）に関して以下の問に答えよ。

(a) $r < a$ において、原点で正則な解を求めよ。

(b) $r > a$ において、$r \to \infty$ で 0 となる解を求めよ。

(c) (a) と (b) で求めた解が $r = a$ で滑らかにつながる条件式を求めよ。

(d) $\kappa a \gg 1$ でポテンシャルがとても深い場合 ($|E| \ll V_0$)、(c) で求めた条件式はどうなるか。また、その場合のエネルギー E の近似式を求めよ。ここで、$\kappa^2 = \dfrac{2\mu}{\hbar^2}(V_0 + E)$ とする。

新世紀の量子力学演習 （川村）

第１１章　角運動量

87. 極座標 $(x, y, z) = (r\sin\theta\cos\phi, r\sin\theta\sin\phi, r\cos\theta)$ を使って、角運動量演算子 $\vec{L} = (L_x, L_y, L_z)$ および昇降演算子 $L_\pm \equiv L_x \pm iL_y$ を書き表せ。

88. 固有値方程式 $L_z\Phi_m(\phi) = m\hbar\Phi_m(\phi)$ を解いて、規格化された固有関数 $\Phi_m(\phi)$ を求めよ。$\Phi_m(\phi)$ は方位角 ϕ に関する 1 価関数とすると、m としてどんな値が許されるか？

89. 次の問に答えよ。

    (a) 慣性モーメント I をもつ剛体に対して、この系を量子力学的に取り扱うことによりエネルギー固有値と固有関数を求めよ。ハミルトニアンは $H = \dfrac{1}{2I}{L_z}^2$ で与えられているとする。

    (b) N 個の同種粒子が円周上に等間隔に固定されている量子力学的な系について、$\dfrac{2\pi}{N}$ 回転に関する不変性を考慮して、この系のエネルギー固有値と固有関数を求めよ。

90. 角運動量演算子及び昇降演算子 $L_\pm \equiv L_x \pm iL_y$ に関する次の関係式を証明せよ。

    (a) $\vec{L}^2 = L_+L_- + {L_z}^2 - \hbar L_z$,　　$\vec{L}^2 = L_-L_+ + {L_z}^2 + \hbar L_z$

    (b) $[L_+, L_-] = 2\hbar L_z,$　　$[L_z, L_+] = \hbar L_+,$　　$[L_z, L_-] = -\hbar L_-$
    $[\vec{L}^2, L_+] = 0,$　　$[\vec{L}^2, L_-] = 0$

91. 前問の交換関係を使って、$\vec{L}^2$ と L_z の固有値を次の順序に従って求めよ。

(a) $\vec{L}^2$ と L_z に関する同時固有関数を $Y_{\lambda m}$ とする。つまり固有値方程式

$$\vec{L}^2 Y_{\lambda m} = \lambda\hbar^2 Y_{\lambda m} \qquad L_z Y_{\lambda m} = m\hbar Y_{\lambda m}$$

が成立する。このとき不等式 $\lambda \geq m^2$ が成り立つことを示せ。

(b) $L_\pm Y_{\lambda m}$ が $\vec{L}^2$ と L_z に関する同時固有関数であることを示し、その固有値を求めよ。

(c) 次の関係を満たす状態 $Y_{\lambda m_{\max}}, Y_{\lambda m_{\min}}$ が存在することを示せ。

$$L_+ Y_{\lambda m_{\max}} = L_- Y_{\lambda m_{\min}} = 0$$

(d) $m_{\max} = l$ とする時、$\lambda = l(l+1) \quad (l = 0, \dfrac{1}{2}, 1, \dfrac{3}{2}, \cdots)$ であることを示せ。

92. $\vec{L}^2$ を極座標を使って書き表せ。$Y_{lm}(\theta,\phi)$ は、固有値方程式

$$\vec{L}^2 Y_{lm} = l(l+1)\hbar^2 Y_{lm}, \qquad L_z Y_{lm} = m\hbar Y_{lm}$$

を満足する。$Y_{lm}(\theta,\phi) = \Theta(\theta)e^{im\phi}$ と変数分離した時、$\Theta(\theta)$ の従う微分方程式を書き下し、その解を求め、$Y_{lm}(\theta,\phi)$ が次の式で与えられることを示せ。

$$Y_{lm}(\theta,\phi) = C_l^m \frac{e^{im\phi}}{(1-u^2)^{m/2}} \frac{d^{l-m}}{du^{l-m}} (1-u^2)^l$$

ここで、$u = \cos\theta$、C_l^m は規格化定数である。また、上の表式を使って、$L_+ Y_{ll} = 0$ が成り立つことを示せ。

新世紀の量子力学演習　（川村）

第１２章　水素原子

93. 水素原子において、陽子（質量 m_p 電荷 e）と電子（質量 m_e 電荷 $-e$）の間にクーロン力（クーロンポテンシャル $V(r) = -e^2/r$）が働く。この時、動径方向に関する水素原子のシュレディンガー方程式は次で与えられる。

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{d}{dr} - \frac{l(l+1)}{r^2}\right)R_{nl}(r) - \frac{e^2}{r}R_{nl}(r) = ER_{nl}(r)$$

ここで、$\mu(= m_e m_p/(m_e + m_p))$ は換算質量である。$\rho = \sqrt{\dfrac{8\mu|E|}{\hbar^2}}r$, $\lambda = \dfrac{e^2}{\hbar}\sqrt{\dfrac{\mu}{2|E|}} = c\alpha\sqrt{\dfrac{\mu}{2|E|}}$ とおくとき、$\hat{R}_{nl}(\rho) = R_{nl}(r)$ に関する微分方程式はどんな形になるか求めよ。

94. ⋆ 前問で求めた $\hat{R}_{nl}(\rho)$ に関する微分方程式について次の問に答えよ。

   (a) $\rho \to \infty$ での解の漸近形を求めよ。

   (b) $\hat{R}_{nl}(\rho) = e^{-\rho/2}G(\rho)$ とおくとき、$G(\rho)$ に関する方程式はどんな形になるか求めよ。

   (c) $G(\rho) = \rho^l L(\rho)$ とおくとき、$L(\rho)$ に関する方程式はどんな形になるか求めよ。

   (d) 級数展開 $L(\rho) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k \rho^k$ を使って、$R_{nl}(r)$ に関するシュレディンガー方程式の固有値 E_n を求めよ。ここで、$n(= \lambda)$ は主量子数と呼ばれる量子数である。

   (e) 規格化されたエネルギーの固有関数 $\psi_{nlm} = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta, \phi)$ をラゲールの陪多項式を使って書き下せ。

95. 水素原子の動径方向に関する以下の波動関数を求め、その概形を図示せよ。　R_{10},　R_{20},　R_{21}
また、基底状態 $(n = 1, l = 0)$ における相対距離 r の期待値 $\langle r \rangle$ を求めよ。

96. * 前々問で求めた水素原子のエネルギースペクトルの縮退について議論せよ。

97. 動径確率密度分布 $P_{nl}(r)$ は次で定義される。

$$P_{nl}(r) \equiv r^2 (R_{nl}(r))^2$$

$P_{nn-1}(r)$ が最大になる r の値を求めよ。

98. ♢ 水素原子に関する次の漸化式を示せ。

$$\frac{k+1}{n^2}\langle r^k \rangle - (2k+1)a_0 \langle r^{k-1} \rangle + \frac{k}{4}[(2l+1)^2 - k^2]a_0^2 \langle r^{k-2} \rangle = 0$$

ここで、$a_0 = \dfrac{\hbar^2}{\mu e^2}$ はボーア半径である。上の関係式は Kramers の漸化式と呼ばれている。

99. Kramers の漸化式を使って、次の期待値を求めよ。
$\langle r^{-1} \rangle$,　$\langle r \rangle$,　$\langle r^2 \rangle$

100. 問 45 で議論したビリアルの定理から導かれる関係式および前問の結果を使って、水素原子の基底状態に関する平均 2 乗速度 $\dfrac{\sqrt{\langle \vec{p}^2 \rangle}}{\mu}$ を計算せよ。

新世紀の量子力学演習　（川村）

第１３章　電子と電磁場の相互作用

101. 外部電磁場のもとで荷電粒子 (質量 m、電荷 e) の運動は次のラグランジアン L によって記述される。(c は光速度)

$$L = \frac{1}{2}m\left(\frac{d\vec{x}}{dt}\right)^2 - e\phi(\vec{x},t) + \frac{e}{c}\vec{A}(\vec{x},t)\cdot\frac{d\vec{x}}{dt} \quad \cdots(a)$$

このラグランジアン L から導かれるオイラー・ラグランジェ方程式は次のようになることを示せ。

$$m\frac{d^2\vec{x}}{dt^2} = e\left(\vec{E}(\vec{x},t) + \frac{1}{c}\frac{d\vec{x}}{dt}\times\vec{B}(\vec{x},t)\right)$$

ここで、

$$\vec{E} = -\vec{\nabla}\phi - \frac{1}{c}\frac{\partial\vec{A}}{\partial t}\ , \quad \vec{B} = \vec{\nabla}\times\vec{A}$$

102. ラグランジアン (a) によって記述される運動は次の変換（ゲージ変換）に対して不変であることを示せ。

$$\begin{cases} \phi(\vec{x},t) \to \phi'(\vec{x},t) = \phi(\vec{x},t) + \frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}\lambda(\vec{x},t)\ , \\ \vec{A}(\vec{x},t) \to \vec{A}'(\vec{x},t) = \vec{A}(\vec{x},t) - \vec{\nabla}\lambda(\vec{x},t) \end{cases}$$

ここで、$\lambda(\vec{x},t)$ は時間および空間座標に依存した任意関数

103. ラグランジアン (a) によって記述される系について、ハミルトニアン H は次の形になることを示せ。

$$H = \frac{1}{2m}\left(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}(\vec{x},t)\right)^2 + e\phi(\vec{x},t)$$

ハミルトニアン H のゲージ変換のもとでの変換性を議論せよ。

104. ⋆ 外部電磁場のもとでの荷電粒子 (質量 m、電荷 e) が従うシュレディンガー方程式は次で与えられる。

$$
\begin{aligned}
i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\vec{x},t) &= \hat{H}\Psi(\vec{x},t) \\
&= \left(\frac{-\hbar^2}{2m}\left(\vec{\nabla}-\frac{ie}{\hbar c}\vec{A}(\vec{x},t)\right)^2 + e\phi(\vec{x},t)\right)\Psi(\vec{x},t)
\end{aligned}
$$

以下の問に答えよ。

(a) ゲージ変換のもとでの変換性を議論せよ。

(b) 外場が時間に依存しない場合、変数分離 ($\Psi(\vec{x},t) = e^{-iEt/\hbar}\psi(\vec{x})$) を行うことによって、$\psi(\vec{x})$ に関するシュレディンガー方程式を求めよ。

(c) $\vec{A} = -\frac{1}{2}\vec{x}\times\vec{B}$, $\phi = -e/r$, $\vec{B} = (0,0,B)$ の時、シュレディンガー方程式は以下のようになることを示せ。(B は定数)

$$
\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2 - \frac{eB}{2mc}L_z + \frac{e^2B^2}{8mc^2}(x^2+y^2) - \frac{e^2}{r}\right)\psi(\vec{x}) = E\psi(\vec{x}) \quad \cdots (b)
$$

(d) シュレディンガー方程式 (b) の左辺の第２項、第３項および第４項の大きさを比較せよ。ただし、$\langle L_z\rangle \simeq \hbar$, $x^2+y^2 \simeq a_0^2$, $r \simeq a_0$ とする。ここで、a_0 はボーア半径

105. B に関する２次の項が無視できる場合について、シュレディンガー方程式 (b) のエネルギー固有値を求めよ。

106. ⋆ $\phi(\vec{x})$ の項が無視できる場合について、シュレディンガー方程式 (b) のエネルギー固有値を円筒座標 ($x = \rho\cos\varphi$, $y = \rho\sin\varphi$) を使って求めよ。

107. ⋆ $\phi(\vec{x})$ の項が無視できる場合について、シュレディンガー方程式

$$
\frac{-\hbar^2}{2m}\left(\vec{\nabla}-\frac{ie}{\hbar c}\vec{A}(\vec{x})\right)^2\psi(\vec{x}) = E\psi(\vec{x})
$$

のエネルギー固有値を $\vec{A} = (0, Bx, 0)$ と選ぶことによって求めよ。

新世紀の量子力学演習　（川村）

第１４章　演算子・行列・スピン

「第７章において、調和振動子に関する固有値問題を演算子法を用いて解いた。それを思い出して、次の問いに答えよ。」

108. 固有ベクトルが、

$$|u_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}(\hat{a}^\dagger)^n|u_0\rangle$$

で与えられるとき、以下の問に答えよ。

(a) 演算子 $\hat{a}^\dagger$、$\hat{a}$、$\hat{x}$、$\hat{p}$ の行列要素を求めよ。例えば、$\hat{H} = \hbar\omega(\hat{a}^\dagger\hat{a}+\frac{1}{2})$ の行列要素は

$$(\hat{H})_{mn} \equiv \langle u_m|\hat{H}|u_n\rangle = \hbar\omega \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 & 0 & \cdot & \cdot \\ 0 & \frac{3}{2} & 0 & \cdot & \cdot \\ 0 & 0 & \frac{5}{2} & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \\ \cdot & \cdot & \cdot & & \cdot \end{pmatrix}$$

(b) 基底状態が、$|u_0\rangle = (1,0,0,....)^T$ で与えられる時、u_n はどんな形になるか求めよ。また直交性 $\langle u_m|u_n\rangle = \delta_{mn}$ を示せ。ここで、^{T} は、転置を表す。

109. 状態ベクトル $|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(1,1,0,0,...)^T$ に関する以下の期待値を計算せよ。

(a) $\langle\hat{H}\rangle$

(b) $\langle\hat{x}\rangle$,　$\langle\hat{x}^2\rangle$,　$\langle\hat{p}\rangle$,　$\langle\hat{p}^2\rangle$

(c) $\Delta x\Delta p$

「角運動量の固有値問題を、演算子法を使って解くと次のようになる。

$$\vec{L}^2|l,m\rangle = \hbar^2 l(l+1)|l,m\rangle$$
$$L_z|l,m\rangle = \hbar m|l,m\rangle$$
$$\langle l,m'|L_z|l,m\rangle = \hbar m\delta_{m'm}$$
$$\langle l,m'|L_\pm|l,m\rangle = \hbar\sqrt{l(l+1)-m(m\pm 1)}\delta_{m'm\pm 1}$$

これらを使って、次の問に答えよ。」

110. 次のそれぞれの場合について、行列要素 L_z, L_+, L_- を求めよ。
(a) $l=\frac{1}{2}$ (b) $l=1$ (c) $l=\frac{3}{2}$
さらに、(c) の場合について L_x, L_y, L_z が角運動量の代数を満足することを示せ。

111. 角運動量 1 の状態に対して、$\vec{n}$ を任意の単位ベクトルとする。行列 $\vec{L}\cdot\vec{n}$ が、次のような多項式を満たすことを示せ。

$$\sum \alpha_k(\vec{L}\cdot\vec{n})^k = 0$$

112. $\star$ スピン $\dfrac{1}{2}$ の系 $(\vec{S} = \dfrac{\hbar}{2}\vec{\sigma})$ について次の問に答えよ。

(a) S_z の固有関数と固有値を求めよ。

(b) 演算子 $S_x\cos\phi + S_y\sin\phi$ の固有関数と固有値を求めよ。また、この固有状態において、S_z の測定値が $\dfrac{\hbar}{2}$ である確率はいくらか。

113. 単位ベクトル $\vec{n} = (\sin\theta\cos\phi, \sin\theta\sin\phi, \cos\theta)$ の方向の $\vec{\sigma}$ の成分を σ_n とするとき σ_n の固有関数を σ_z の固有値 1 の固有関数 $\psi^{(+)}$ と σ_z の固有値 -1 の固有関数 $\psi^{(-)}$ を使って表せ。

「ハミルトニアン $\hat{H}$ が $\hat{H} = -\vec{M}\cdot\vec{B}$ で記述される系について以下の問 114 と 115 に答えよ。ここで、$\vec{B}$ は外部磁場、$\vec{M}$ は磁気モーメントで磁気回転比 $g = 2(1 + \frac{\alpha}{2\pi} + \cdots) = 2.0023192$ とスピン演算子 $\vec{S}$ を使って $\vec{M} = -\frac{eg}{2mc}\vec{S}$ と表される。」

114. * スピン $\frac{1}{2}$ の系 ($\vec{S} = \frac{\hbar}{2}\vec{\sigma}$) について

   (a) 波動関数を $\psi(t) = (\psi^{(+)}(t), \psi^{(-)}(t))^T$、一様磁場 $\vec{B} = (0, 0, B)$ とするとき、シュレディンガー方程式を書き下せ。

   (b) 初期状態を $\psi(0) = (\psi_0^{(+)}, \psi_0^{(-)})^T$ として、シュレディンガー方程式の解を求めよ。

   (c) 初期状態が、S_x の固有値 $\frac{\hbar}{2}$ の固有状態であったとする。$\langle S_x\rangle$ および $\langle S_y\rangle$ の時間発展を求めよ。

115. $^\diamond$ スピンの大きさが S の系について

   (a) 一様磁場 $\vec{B} = (0, 0, B)$ が作用している時、シュレディンガー方程式の解を求めよ。

   (b) $\langle S_z\rangle$ および $\langle S_x + iS_y\rangle$ の時間発展を求めよ。

新世紀の量子力学演習　（川村）

第１５章　角運動量の合成

116. スピン演算子 $\vec{S}_1 = \hbar\vec{\sigma}_1/2$、$\vec{S}_2 = \hbar\vec{\sigma}_2/2$ を持つ 2 個の電子について次の問に答えよ。ここで、$\vec{S}_1^2$ と S_{1z} の同時固有関数を $\chi_+^{(1)}, \chi_-^{(1)}$、$\vec{S}_2^2$ と S_{2z} の同時固有関数を $\chi_+^{(2)}, \chi_-^{(2)}$ とする。

    (a) $\vec{S} = \vec{S}_1 + \vec{S}_2$ とするとき、$\vec{S}^2$ と S_z の同時固有関数および固有値を求めよ。

    (b) また、上で求めた固有関数は、$\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2$ の固有状態でもある。その固有値を求めよ。

117. 軌道角運動量 $\vec{L}$ とスピン $\vec{S} = \hbar\vec{\sigma}/2$ の合成について考えよう。全角運動量を $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$ とする。関数 $\psi_{j,m+\frac{1}{2}} = \alpha Y_{l,m}\chi_+ + \beta Y_{l,m+1}\chi_-$ が $\vec{J}^2$ の固有状態となるような α と β の値を求めよ。ただし、$S_+\chi_+ = S_-\chi_- = 0$, $S_\pm\chi_\mp = \hbar\chi_\mp$ とする。

118. * 軌道角運動量 $\vec{L}$ とスピン 1 の合成について考えよう。

    (a) $\vec{S}^2$ と S_z の同時固有関数を求めよ。ここで、$\vec{S}$ はスピン 1 の演算子とする。

    (b) 上で求めた S_z の固有値 $\hbar,\ 0,\ -\hbar$ の固有関数を ξ_+, ξ_0, ξ_- とすると、S_+、S_- を作用させたときどうなるか。

    (c) $\vec{J}^2$ を関数 $\psi_{j,m+1} = \alpha Y_{l,m}\xi_+ + \beta Y_{l,m+1}\xi_0 + \gamma Y_{l,m+2}\xi_-$ に作用させた時、どうなるか求めよ。ここで、$\vec{J}$ は全角運動量 $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$ とする。

    (d) $\vec{J}^2\psi_{j,m} = \hbar^2 j(j+1)\psi_{j,m}$ を使って、α, β, γ の間に成り立つ関係式を導け。

119. ⋆ $\vec{J}_1^2$ と J_{1z} に関する同時固有関数を $\psi^{(1)}_{J_1,M_1}$、$\vec{J}_2^2$ と J_{2z} に関する同時固有関数を $\psi^{(2)}_{J_2,M_2}$ とし、$\vec{J}^2=(\vec{J}_1+\vec{J}_2)^2$ と $J_z=J_{1z}+J_{2z}$ に関する同時固有関数を $\psi_{J,M}$ とする。関数 $\psi_{J,M}$ と関数 $\psi^{(1)}_{J_1,M_1}\psi^{(2)}_{J_2,M_2}$ の間には次の関係が成立する。

$$\psi_{J,M}=\sum_{M_1,M_2}\langle J_1J_2M_1M_2|JM\rangle\psi^{(1)}_{J_1,M_1}\psi^{(2)}_{J_2,M_2}$$

展開係数を Clebsch-Gordan 係数という。

(a) Clebsch-Gordan 係数に関する次の直交性を示せ。

$$\sum_{M_1,M_2}\langle JM|J_1J_2M_1M_2\rangle\langle J_1J_2M_1M_2|J'M'\rangle=\delta_{JJ'}\delta_{MM'}$$
$$\sum_{J}\langle J_1J_2M_1M_2|JM\rangle\langle JM|J_1J_2M_1'M_2'\rangle=\delta_{M_1M_1'}\delta_{M_2M_2'}$$

(b) Clebsch-Gordan 係数に関する次の漸化式を示せ。

$$\begin{aligned}&\sqrt{J(J+1)-M(M\pm1)}\langle J_1J_2M_1M_2|JM\pm1\rangle=\\&\sqrt{J_1(J_1+1)-M_1(M_1\mp1)}\langle J_1J_2M_1\mp1M_2|JM\rangle\\&+\sqrt{J_2(J_2+1)-M_2(M_2\mp1)}\langle J_1J_2M_1M_2\mp1|JM\rangle\end{aligned}$$

120. スピン 1 の粒子が、次のようなポテンシャルの中を運動するとき、$J=L+1,L,L-1$ の状態について、$V(r)$ の値を求めよ。

$$V(r)=V_1(r)+\frac{(\vec{S}\cdot\vec{L})}{\hbar^2}V_2(r)+\frac{(\vec{S}\cdot\vec{L})^2}{\hbar^4}V_3(r)$$

121. 次のようなハミルトニアンで記述されるスピン $\vec{S}_1$ と $\vec{S}_2$ を持った 2 粒子系について以下の問に答えよ。(A,B,C は定数)

$$H=A+\frac{B}{\hbar^2}\vec{S}_1\cdot\vec{S}_2+\frac{C}{\hbar}(S_{1z}+S_{2z})$$

(a) スピン 1/2 の同種粒子の場合、系の固有関数と固有値を求めよ。

(b) スピン 1/2 とスピン 1 の粒子の場合はどうか。

新世紀の量子力学演習　　　　（川村）

第１６章　近似法

122. * ハミルトニアン H_0 に関する規格化された固有関数の完全系 $\{\phi_n\}$ とその固有値 E_n^0 がわかっているとする。つまり、$H_0\phi_n = E_n^0\phi_n$ であるとする。パラメータ λ を含む補正されたハミルトニアン $H = H_0 + \lambda H_1$ の固有関数 ψ_n と固有値 E_n を λ の値が十分小さいとして摂動論を使って、λ の２次のオーダーまで求めよ。ただし、H_0 の固有値に縮退はないとする。

123. * 前問において、縮退がある場合はどうなるか? λ の１次のオーダーまでで議論せよ。

124. 摂動論の有効性を次で与えられる厳密に解けるハミルトニアン H を使って調べよう。

$$H = H_0 + \lambda H_1$$
$$H_0 = \begin{pmatrix} E_1^0 & 0 \\ 0 & E_2^0 \end{pmatrix} \qquad H_1 = \begin{pmatrix} \alpha & \gamma \\ \gamma^* & \beta \end{pmatrix}$$

   (a) λH_1 を H_0 に関する補正とみなし、摂動論を適用して H の固有値を λ の２次のオーダーまで求めよ。

   (b) H の固有値を厳密に求めよ。また、λ が十分小さいとして固有値を λ のべきで展開して、２次のオーダーで (a) の結果と一致することを確かめよ。

125. * 摂動論の応用として、水素原子のエネルギー準位に対する外部電場の影響を議論しよう。１２章で議論したように水素原子に関するハミルトニアン H_0 は

$$H_0 = \frac{\vec{p}^2}{2\mu} - \frac{e^2}{r}$$

で与えられ、その固有関数は $\psi_{nlm} = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta, \phi)$ である。第１励起状態は４重に縮退した状態 ψ_{200},ψ_{211},ψ_{210}, ψ_{21-1} から成り立っている。外部電場の影響により、ハミルトニアンが次のような補正 eEz を受けるとする。（E は定数）

$$H = H_0 + eEz$$

エネルギー準位はどのように変化するか議論せよ。（シュタルク効果）

126. ハミルトニアン $H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{m\omega^2}{2}x^2 = \hbar\omega a^\dagger a$ で記述される１次元の調和振動子に対して次のような補正 λH_1 が加わった場合、エネルギー固有値がどれだけ変化するか計算せよ。

   (a) $\lambda H_1 = \lambda x^4$ に対して、λ の１次のオーダーまで求めよ。

   (b) $\lambda H_1 = \lambda x^3$ に対して、λ の２次のオーダーまで求めよ。

127. 任意の規格化された波動関数 $\psi(x)$ に対して、ハミルトニアン H の期待値 $\langle H \rangle$ は、

$$\langle H \rangle \equiv \int \psi^*(x) H \psi(x) dx$$

で与えられる。

   (a) $\psi(x)$ は、H の規格直交化された固有関数 $u_n(x)$ (固有値 E_n) を使って、$\psi(x) = \sum_n a_n u_n(x)$ のように展開される時、$\langle H \rangle$ を E_n と a_n を使って書き下せ。

   (b) 基底状態のエネルギー固有値を E_0 とする時、次の不等式が成り立つことを示せ。

$$\langle H \rangle \geq E_0$$

(c) 上の不等式で、等号が成立するのはどんな場合か?

「前問の不等式の左辺の極小を求めるために、ψ としてあるパラメータ α を含むある特別な形の関数 (試行関数) $\psi_0(x,\alpha)$ を考えよう。この時、左辺は α の関数 $F(\alpha)$ である。$F(\alpha)$ を極小にする α の値を α_0 とすると基底状態の近似的な波動関数は、$\psi_0(x,\alpha_0)$ で与えられる。このような近似法は変分法と呼ばれていて、励起状態を求める場合にも拡張できる。」

128. 次のハミルトミアン H で記述される 1 次元の調和振動子に対してを変分法を適用してみよう。

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{m\omega^2}{2}x^2$$

以下の問に答えよ。

(a) 基底状態に関する試行関数として、

$$\psi_0(x,\alpha) = Ae^{-\alpha x^2} \qquad (\alpha > 0, A \text{ は定数})$$

を選んだ時、$\psi_0(x,\alpha_0)$ および $F(\alpha_0)$ を求めよ。
ここで、公式

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-bx^2}dx = \sqrt{\frac{\pi}{b}} \qquad \int_{-\infty}^{\infty} e^{-bx^2}x^2dx = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{b^3}}$$

を使え。

(b) (a) で得られた $\psi_0(x,\alpha_0)$ は、H の固有関数であることを示せ。また、その固有値を求めよ。

(c) 第 1 励起状態に関する試行関数として $\psi_1(x,\beta) = (B + Cx)e^{-\beta x^2}$ を選んだ時、どうなるか? (B, C は定数、β は変分パラメータ)

「量子力学演習の評価について」　（参考資料）

原則として、以下のようなポイント制を使います。

1. ⋆ 印がついていない問題の解答を授業中に発表[1] した人
   ⟶ 5 ポイント Get!!

2. ⋆ 印がついた問題の解答を授業中に発表し
   発表者以外の受講者が提出したレポート[2] の添削と評価をした人
   ⟶ 10 ポイント Get!!

3. レポート提出者の得るポイント数[3]
   レポートがよくできている ⟶ 2 ポイント Get!
   まあまあ ⟶ 1 ポイント Get!
   よくない ⟶ 0 ポイント

4. ♢ 印のついた問題はやや難、余裕のある人は挑戦してみてください。
   レポート問題ではないが、解いた人は 10 ポイント Get!!

1. 2. 3. 4. で得た合計ポイント数により、各セメスターの成績の評価を行います。

[1] 発表に関しては「発表について」参照
[2] レポートに関しては「レポートについて」参照
[3] レポートの評価は基本的に発表者に任せます。

「発表について」

1. 要点だけを板書すること（計算の過程が長い場合は適当に省略しても構わない。）
2. ただし、数値計算に関する部分は数値を代入した式も板書すること
3. キーワードは忘れずに板書すること
4. 説明も簡潔に!!

問題１ $\star$ を例のとると、解答を説明するために最低限必要な項目
a) Boltzmann の原理と量子仮説の簡単な説明
b) それらを使ったエネルギーの平均値 $\langle E \rangle$ の導出
プランク分布は以下の公式を使って求めることができる。
$u(\nu, T)d\nu = (\nu$ と $\nu + d\nu$ の間の振動状態の数) $\times \langle E \rangle$
(ν と $\nu + d\nu$ の間の振動状態の数) $= 8\pi\nu^2 d\nu / c^3$ の導出はスペースをとるので省略しても構わない。ただし、レポートでは必ず導出も記述すること!!

「レポートについて」

$\star$ がついた問題は解答が授業で発表された後、レポート問題に Change!
$\longrightarrow$ 翌週までに発表者にレポートを提出
（詳しい計算も省略せずに書くこと）
$\longrightarrow$ 翌々週までに発表者がレポートを添削、評価し、評価結果とレポートを授業担当者まで提出
$\longrightarrow$ 評価結果を記入した後、レポートを返却