２０１２年度 量子力学第二 期末試験 (2012/7/31)

注意

- 教室に間違いはありませんか？
  H112 : 10_00634〜10_15216
  H113 : それ以外
- 学生証を机の上に置いてください。
- 試験中は筆記用具、学生証以外のものは机の下に片付けてください。
- 携帯は電源を切るかマナーモードにした上でかばんの中にしまってください。
- 試験監督の指示に従わずカンニング等の不正行為を行って懲戒処分を受けると、当該学期に履修申告した全ての科目の成績が０点となります。
- 問題冊子 (これ) は表紙も含めて７枚です。試験が終わったら持ち帰ってください。
- 答案用紙は１枚です。持ち帰らないで下さい。
- 計算用紙はありません。問題の裏を使ってください。
- 開始して３０分経ったら答案用紙を提出した上で退室して結構です。
- 採点は今週中に行い、来週中に合格者の番号を今村の部屋（本館１階 R100C）のドアに張り出す予定です。

1　LS 結合（2 点 × 25 問）

次のハミルトニアンで与えられる、球対称ポテンシャル $U(r)$ 中の粒子について考える。粒子はスピン 1/2 を持つとする。

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_{LS}. \tag{1}$$

ただし $\hat{H}_0$ は粒子の軌道運動を、$\hat{H}_{LS}$ はスピンと軌道運動の相互作用を表すハミルトニアンであり、それぞれ次のように与えられる。

$$\hat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m}\boldsymbol{\nabla}^2 + U(r), \quad \hat{H}_{LS} = \zeta\, \hat{\boldsymbol{l}} \cdot \hat{\boldsymbol{s}}. \tag{2}$$

文字の意味は以下の通りである。

- m : 粒子の質量
- $\hat{\boldsymbol{l}}$: $\hbar$ で割って無次元化した角運動量演算子
- $\hat{\boldsymbol{s}}$: $\hbar$ で割って無次元化したスピン演算子
- r : 動径座標
- ζ : LS 結合の大きさを表す定数

$\hat{s}$

軌道角運動量演算子 $\hat{\boldsymbol{l}}$ を用いて定義された固有状態を $|l,m\rangle_L$ のように添え字 L をつけて表すことにする。スピン角運動量 $\hat{\boldsymbol{l}}$ や全角運動量 $\hat{\boldsymbol{j}} = \hat{\boldsymbol{l}} + \hat{\boldsymbol{s}}$ の場合には添え字 S および J をつけて表すことにする。$|l,m\rangle_L$ に対して次の式が成り立つ。

$$\begin{aligned}
\hat{\boldsymbol{l}}^2|l,m\rangle_L &= l(l+1)|l,m\rangle_L, \\
\hat{l}_+|l,m\rangle_L &= \sqrt{(l-m)(l+m+1)}|l,m+1\rangle_L, \\
\hat{l}_-|l,m\rangle_L &= \sqrt{(l+m)(l-m+1)}|l,m+1\rangle_L, \\
\hat{l}_z|l,m\rangle_L &= m|l,m\rangle_L.
\end{aligned} \tag{3}$$

ただし $\hat{l}_\pm = \hat{l}_x \pm i\hat{l}_y$ である。これらは次の正規直交関係を満足するとする。

$${}_L\langle l,m|l',m'\rangle_L = \delta_{l,l'}\delta_{m,m'}. \tag{4}$$

$|l,m\rangle_S$ や $|l,m\rangle_J$ に対しても同様の式が成り立つ。

1.1、1.2、1.3 の文章中の空欄に入る適切な式、値などを答えよ。

1.1　スピンを考慮しない場合

まず始めに、粒子のスピンのことは無視して軌道運動のみに注目しよう。この場合、ハミルトニアンは $\hat{H} = \hat{H}_0$ であり、粒子の束縛状態は

- 主量子数 n
- 方位量子数 l
- 磁気量子数 m

の 3 つの量子数によって指定される。これらはいずれも整数であり、大小関係 $|m| \leq l < n$ を満足する。$U(r)$ が $1/r$ に比例するクーロンポテンシャルの場合にはエネルギー固有値は n, l, m のうち $\boxed{\text{（ア）}}$ のみに依存するが、一般の球対称ポテンシャルの場合には n と l に依存する。ここでは後者の場合を考え、(n,l) の値が異なる状態は異なるエネルギーを持つと仮定する。

$(n,l) = (2,1)$ の場合について考えよう。このとき $m = +1, 0, -1$ に対応する 3 つの状態

$$|1,+1\rangle_L, \quad |1,0\rangle_L, \quad |1,-1\rangle_L \tag{5}$$

は全て $\hat{H}_0$ の固有状態で、同じエネルギー固有値に属する。このエネルギーを E_0 とする。（以下では n は 2 に固定して考えるので、わざわざ書かない。）これらの状態の重ね合わせ

$$|\psi\rangle = c_{+1}|1,+1\rangle_L + c_0|1,0\rangle_L + c_{-1}|1,-1\rangle_L \tag{6}$$

もやはり $\hat{H}_0$ の固有状態であり、その固有値は E_0 である。(6) の状態が規格化されているためには（つまり $\langle\psi|\psi\rangle = 1$ であるためには）係数 c_{+1}, c_0, c_{-1} は式 $\boxed{\text{（イ）}}$ を満たさなければならない。

1.2　スピンを考慮するが LS 結合を無視する場合

次に、粒子のスピン状態を考慮した場合を考えよう。ただし $\zeta = 0$ であるとして LS 結合の効果は無視する。粒子のスピンは 1/2 であるから、スピン状態は $|\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}\rangle_S$ と $|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle_S$ によって表される。従って、軌道運動の状態とスピン状態の両方を合わせた状態は、次の 6 つの状態ベクトルの線形結合として表すことができる。

$$\begin{aligned}
|a\rangle &= |1,+1\rangle_L|\tfrac{1}{2},+\tfrac{1}{2}\rangle_S, \\
|b\rangle &= |1,+1\rangle_L|\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}\rangle_S, \\
|c\rangle &= |1,0\rangle_L|\tfrac{1}{2},+\tfrac{1}{2}\rangle_S, \\
|d\rangle &= |1,0\rangle_L|\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}\rangle_S, \\
|e\rangle &= |1,-1\rangle_L|\tfrac{1}{2},+\tfrac{1}{2}\rangle_S, \\
|f\rangle &= |1,-1\rangle_L|\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}\rangle_S.
\end{aligned} \tag{7}$$

これらは全角運動量演算子 $\hat{\boldsymbol{j}} = \hat{\boldsymbol{l}} + \hat{\boldsymbol{s}}$ の z 成分 $\hat{j}_z$ の固有状態であり、次の式が成り立つ。

$$
\begin{aligned}
\hat{j}_z|a\rangle &= \boxed{\text{(ウ)}}\,|a\rangle, \\
\hat{j}_z|b\rangle &= \boxed{\text{(エ)}}\,|b\rangle, \\
\hat{j}_z|c\rangle &= \boxed{\text{(オ)}}\,|c\rangle, \\
\hat{j}_z|d\rangle &= \boxed{\text{(カ)}}\,|d\rangle, \\
\hat{j}_z|e\rangle &= \boxed{\text{(キ)}}\,|e\rangle, \\
\hat{j}_z|f\rangle &= \boxed{\text{(ク)}}\,|f\rangle.
\end{aligned}
\tag{8}
$$

これら 6 個の状態は全て $\hat{H}_0$ の固有状態であり、それらの $\hat{H}_0$ の 固有値はすべて $\boxed{\text{(ケ)}}$ である。

1.3 LS 結合を考慮する場合

最後に、$\zeta \neq 0$ として LS 結合の影響を調べよう。ζ は十分小さく、$\hat{H}_0$ のスペクトルのエネルギー間隔に比較してわずかしかエネルギーは変化しないものとする。ここでも $(n, l) = (2, 1)$ である 6 個の状態 $|a\rangle \sim |f\rangle$ およびそれらの線形結合についてのみ考える。

LS 結合を考える前に、(7) の 6 個の状態から $\hat{\boldsymbol{j}}^2$ の固有状態を作っておくと便利である。ここでは軌道角運動量が $l = 1$、スピン角運動量が $s = \frac{1}{2}$ の状態を考えているから、それらを合成して得られる全角運動量の大きさ j には $j = \boxed{\text{(コ)}}$ と $j = \boxed{\text{(サ)}}$ の二つの場合が考えられる。((コ)>(サ) となるように書くこと。) $|a\rangle \sim |f\rangle$ の 6 つの状態のうち、$\hat{j}_z$ の固有値が最も小さい状態 $\boxed{\text{(シ)}}$ は、角運動量の大きさ $j = \boxed{\text{(コ)}}$ を持つ。これ以外に $j = \boxed{\text{(コ)}}$ を持つ状態は全て $\boxed{\text{(シ)}}$ に繰り返し $\hat{j}_+$ を作用させることによって得ることができる。例えば、

$$
\hat{j}_+ \boxed{\text{(シ)}} = \boxed{\text{(ス)}}\,\boxed{\text{(セ)}} + \boxed{\text{(ソ)}}\,\boxed{\text{(タ)}} \tag{9}
$$

である。((ス) と (ソ) には実数を、(セ) と (タ) には $|a\rangle$ から $|f\rangle$ のどれかを入れること。右辺の二つの項の順序は (ス)>(ソ) となるように選べ。) この右辺を規格化すると、

$$
\boxed{\text{(チ)}}\,\boxed{\text{(セ)}} + \boxed{\text{(ツ)}}\,\boxed{\text{(タ)}} \tag{10}
$$

である。((チ) は正の実数になるようにせよ。) この状態は $\hat{j}_z$ の固有状態であり、その固有値は $\boxed{\text{(テ)}}$ である。このような $\hat{j}_+$ を作用させて規格化するという

操作をあと $\boxed{\quad(\text{ト})\quad}$ 回繰り返すと状態 $\boxed{\quad(\text{ナ})\quad}$ （$|a\rangle$ から $|f\rangle$ のどれかである）が得られ、さらにもう一回 $\hat{j}_+$ を作用させると 0 になる。

$j =$ $\boxed{\quad(\text{サ})\quad}$ を持つ状態を構成するには式 (10) の状態と直交する状態

$$\boxed{\quad(\text{ニ})\quad}\ \boxed{\quad(\text{セ})\quad} + \boxed{\quad(\text{ヌ})\quad}\ \boxed{\quad(\text{タ})\quad} \tag{11}$$

(規格化をすること。(ニ) が正の実数になるようにすること。）から出発して $\hat{j}_+$ を作用させればよい。

以上の手続きにより、$\hat{\boldsymbol{j}}^2$ の固有状態を得ることができる。演算子の関係式

$$\hat{\boldsymbol{l}} \cdot \hat{\boldsymbol{s}} = \frac{1}{2}(\hat{\boldsymbol{j}}^2 - \hat{\boldsymbol{l}}^2 - \hat{\boldsymbol{s}}^2) \tag{12}$$

が成り立つことを用いると、$j =$ $\boxed{\quad(\text{コ})\quad}$ の状態のエネルギー、すなわちハミルトニアン $\hat{H}_0 + \hat{H}_{LS}$ の固有値は $\boxed{\quad(\text{ネ})\quad}$ と得られる。同様に $j =$ $\boxed{\quad(\text{サ})\quad}$ の状態についてもエネルギーが計算できる。こうして求まった二つのエネルギーの差は $\boxed{\quad(\text{ノ})\quad}$ （どちらからどちらを引いても良い。）である。

2　ボルン近似（5 点 × 10 点）

以下の文章の空欄にあてはまる適切な式、語句などを答えよ。

半径 a の球の内部でのみ 0 でない定数値 U_0 を持ち、それ以外では 0 であるポテンシャルを考える。

$$U(\boldsymbol{x}) = U_0 \quad (|\boldsymbol{x}| \le a), \quad U(\boldsymbol{x}) = 0 \quad (|\boldsymbol{x}| > a), \tag{13}$$

シュレーディンガー方程式は

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \boldsymbol{\nabla}^2 + U(\boldsymbol{x}) \right) \psi(\boldsymbol{x}) = E\psi(\boldsymbol{x}) \tag{14}$$

である。U_0 が微小量であると仮定し、U_0 による展開を行うことでこのポテンシャルに波数ベクトル $\boldsymbol{k}$ の平面波を入射させたときの散乱断面積を計算しよう。$k = |\boldsymbol{k}|$ とする。入射波を一定にしつつポテンシャルの強さ U_0 を変化させると波動関数は変化する。つまり波動関数を（$\boldsymbol{x}$ と）U_0 の関数とみなすことができる。そこで波動関数を U_0 で展開し、次のように置く。

$$\psi(\boldsymbol{x}) = e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}} + \psi_1(\boldsymbol{x}) + \mathcal{O}(U_0^2). \tag{15}$$

ただし、右辺第 1 項は入射波を表し、ψ_1 は散乱波のうち U_0 に対して 1 次の部分である。U_0 に対して二次以上の項 $\mathcal{O}(U_0^2)$ は以下では無視する。

(14) に (15) を代入して U_0 の 0 次の部分と 1 次の部分とに分けると、0 次の部分は

$$\boxed{\text{（あ）}} \tag{16}$$

1 次の部分は

$$\boxed{\text{（い）}} \tag{17}$$

となる。式 (16) より E と k の関係 $\boxed{\text{（う）}}$ が得られる。これを用いて式 (17) を整理すると、

$$(\boldsymbol{\nabla}^2 + k^2)\psi_1 = \boxed{\text{（え）}} \tag{18}$$

が得られる。この微分方程式はグリーン関数

$$G(\boldsymbol{x}) = -\frac{1}{4\pi r} e^{ikr} \tag{19}$$

を用いて解くことができる。$G(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}')$ は $\boxed{\text{（お）}}$ （どのような波かを言葉で簡単に説明せよ。）を表し、

$$(\boldsymbol{\nabla} + k^2)G(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}') = \delta(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}') \tag{20}$$

(右辺は 3 次元のデルタ関数である。) を満足する。このことを用いれば、(18) の解を

$$\psi_1(\boldsymbol{x}) = \int d^3\boldsymbol{x}' \boxed{\quad (\text{か}) \quad} \tag{21}$$

と与えることができる。

散乱断面積を求めるために、波動関数 $\psi_1(\boldsymbol{x})$ が遠方でどのように振舞うかを調べよう。$\boldsymbol{x}$ と同じ向きで長さが k であるベクトル $\boldsymbol{k}'$ を導入しよう。これは散乱波の波数ベクトルとみなすことができる。(21) の被積分関数は $|\boldsymbol{x}'| \leq a$ のところでのみ 0 でないから、$|\boldsymbol{x}| \gg a$ であれば $|\boldsymbol{x}| \gg |\boldsymbol{x}'|$ が成り立つ。このとき近似式

$$|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}'| = |\boldsymbol{x}| - \frac{1}{k}\boldsymbol{k}' \cdot \boldsymbol{x}' \tag{22}$$

が成り立つことを用いれば (21) を次のように書き換えることができる。

$$\psi_1(\boldsymbol{x}) = -Ae^{ikr} \int_{|\boldsymbol{x}'| \leq a} d^3\boldsymbol{x}' e^{i(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')\cdot\boldsymbol{x}'}, \quad A = \frac{mU_0}{2\pi r \hbar^2} \tag{23}$$

とる

(以下では解答に文字 A を用いてよい。)

入射波の波動関数の波長が a に較べて非常に大きい極限では式 (23) の積分が簡単に計算できて

$$\psi_1(\boldsymbol{x}) = \boxed{\quad (\text{き}) \quad} \tag{24}$$

ヒント
本当に簡単です。

になる。このとき、微分散乱断面積は

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \boxed{\quad (\text{く}) \quad} \tag{25}$$

ヒント
角度によらない

であり、全散乱断面積は

$$\sigma_{\text{tot}} = \boxed{\quad (\text{け}) \quad} \tag{26}$$

である。

ポテンシャルを変化させずに入射波の波長を短くしていくと、散乱断面積は $\boxed{\quad (\text{こ}) \quad}$ する。(増加または減少を答えよ。)