2018 年度偏微分方程式と量子論：演習問題 7

佐々木 格

2019 年 1 月 23 日

21 球面調和関数

球面 $S^2 = \{\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^3 | |\boldsymbol{x}| = 1\}$ の点を極座標による角度 $(\theta, \phi) \in [0, \pi] \times [0, 2\pi]$ で表す。S^2 上で定義された関数 $f(\theta, \phi), g(\theta, \phi)$ に対する内積を

$$\langle f, g \rangle_{S^2} := \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\pi} \sin\theta d\theta \overline{f(\theta, \phi)} g(\theta, \phi)$$

で定義する。また Y_l^m を次のような $\widehat{\boldsymbol{L}^2}$ と $\hat{L}_x$ の同時固有関数とする。

$$\begin{aligned} \widehat{\boldsymbol{L}^2} Y_l^m(\theta, \phi) &= \hbar^2 l(l+1) Y_l^m(\theta, \phi), \\ \hat{L}_z Y_l^m(\theta, \phi) &= \hbar m Y_l^m(\theta, \phi), \end{aligned}$$

さらに Y_l^m は $\langle Y_l^m, Y_l^m \rangle_{S^2} = 1$ の意味で規格化されているものとする。$Y_l^{-l}(\theta, \phi)$ は

$$Y_l^{-l} = \sqrt{\frac{(2l+1)!}{4\pi (2^l l!)^2}} \sin^l \theta e^{-il\phi}$$

であることがわかっている。定数倍を除けば Y_l^m に $\hat{L}_+ = \hat{L}_x + i\hat{L}_y$ を作用させると Y_l^{m+1} が得られる。つまり規格化定数を N_{lm} として

$$Y_l^{m+1} = N_{lm} \hat{L}_+ Y_l^m$$

となる。

(i) $\|\hat{L}_+ Y_l^m\|^2 = \left\langle \hat{L}_+ Y_l^m, \hat{L}_+ Y_l^m \right\rangle$ を計算し，規格化定数 $N_{lm} > 0$ を決定せよ。

(ii) $Y_0^0(\theta, \phi), Y_1^{-1}(\theta, \phi), Y_1^0(\theta, \phi), Y_1^1(\theta, \phi)$ を計算せよ。

22 電子のスピンとパウリ行列

次の 2×2 行列の 3 つの組 $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3)$ を Pauli 行列という：

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

電子は空間の自由度 $\mathbb{R}^3$ の他にスピンと呼ばれる内部自由度をもつ[*1]。電子のスピンの状態は $\mathbb{C}^2$ の 0 でないベクトルによって表される。電子はスピンに由来する角運動量を持ち，対応する演算子は演算子は $\hat{\mathbf{s}} = (\hat{s}_x, \hat{s}_y, \hat{s}_z) := \frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\sigma}$ である。

(a) Pauli 行列が関係式

$$\begin{aligned} &\sigma_1\sigma_2 = i\sigma_3, \quad \sigma_2\sigma_3 = i\sigma_1, \quad \sigma_3\sigma_1 = i\sigma_2 \\ &\sigma_i\sigma_j + \sigma_j\sigma_i = 2\delta_{i,j}, \qquad i, j = 1, 2, 3. \end{aligned}$$

[*1] 回転のようなものを想像すればよい

を満たす事を確かめよ。

(b) $[\hat{s}_x, \hat{s}_y] = i\hbar \hat{s}_z$ 及び $x \to y \to z \to x$ とサイクリックに x, y, z を置き換えた関係式が成り立つことを示せ。

(c) $\hat{s}_\sharp (\sharp = x, y, z)$ はそれぞれ固有値 $\pm\hbar/2$ を持つ事を確かめ、対応する固有ベクトルを求めよ。固有ベクトルは規格化しておくこと。

(d) $\hat{s}_z$ の固有値 $\pm\hbar/2$ に対応する固有ベクトルは

$$|\uparrow\rangle := \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \qquad |\downarrow\rangle := \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \tag{1}$$

であることはすぐにわかる。そして，$|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle$ をそれぞれ，スピンが上向き，下向きの状態であるという。この二つのスピンの向きの電子の状態を重ね合わせて状態 $\psi = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle)$ を作ろう。この電子のスピンは $\hat{s}_x$ の固有ベクトルであることを示せ。また，固有値はいくつか？

(d) 磁場 $\mathbf{B} = (B_x, B_y, B_z)$ の中に置かれた電子のスピンのエネルギーは

$$\hat{H} = g_e \frac{e}{2m} \hat{\mathbf{s}} \cdot \mathbf{B} \tag{2}$$

で与えられる[*2]。上向きの磁場 $\boldsymbol{B} = (0, 0, B)$, $B > 0$ のとき，上向きスピンと下向きスピンでは，どちらがエネルギーが低いか？[*3]

(e) 電子のスピン $u(t) = \begin{pmatrix} u_1(t) \\ u_2(t) \end{pmatrix}$ の時間変化は方程式 $i\hbar \frac{d}{dt} u(t) = \hat{H} u(t)$ に従う。したがって，$u(t) = \exp(-it\hat{H}/\hbar) u(0)$ である。磁場 $\mathbf{B} = (0, 0, B)$ に対して，$\exp(-it\hat{H}/\hbar)$ を計算せよ。

(f) 状態 $|\rightarrow\rangle := \frac{1}{\sqrt{2}} \binom{1}{1}$ はどのような状態か？ $u(0) = |\rightarrow\rangle$ に対して，$u(t) = \exp(-it\hat{H}/\hbar) u(0)$ を計算せよ。$u(t)$ は周期関数であるが，その角振動数はいくつか[*4]？

23 ガウス積分の復習

$a, b \in \mathbb{C}$ に対して $I(a) := \int_{\mathbb{R}} e^{-ax^2} dx,\ I(a, b) := \int_{\mathbb{R}} e^{-ax^2 + bx} dx$ とおく。

(i) $a > 0$ のとき，$I(a) = \sqrt{\pi/a}$ を示せ。

(ii) $a > 0$，$b \in \mathbb{C}$ のとき $I(a, b)$ を求めよ。

(iii) $a = s + ti$ $(s > 0, t \in \mathbb{R})$，$b \in \mathbb{C}$ のとき $I(a, b)$ を求めよ。

(iv) $I(3 + 4i, 5 + 6i)$ を求めよ。

(v) $\mathbb{R}$ で定義された関数 $\exp(-(3 + 4i)x^2 + 5 + 6i)$ を規格化せよ。

24 並進

運動量演算子 $\hat{p} = -i\hbar(\partial/\partial x)$ から生成されるユニタリ演算子 $e^{-ia\hat{p}/\hbar}$ を考える (a は実数)。任意の波動関数 $\psi(x)$ について

$$(e^{-ia\hat{p}/\hbar}\psi)(x) = \psi(x - a) \tag{3}$$

が成り立つ事を示せ。ただし，$\psi(x)$ は解析関数で，テイラー展開できると仮定してよい。

（注意）時間を進める演算子が $e^{-it\hat{H}/\hbar}$ であるのに対し，位置を a だけ進める演算子が $e^{-ia\hat{p}/\hbar}$ である。エルミート演算子 A に対し，$e^{isA}, s \in \mathbb{R}$ を A によって生成されるユニタリ群といい，A をその生成子 (generator) という。並進の生成子は運動量である。

[*2] ここに g_e は g 因子 (g-factor) と呼ばれている定数で、はじめは $g_e = 2$ とされたが，後に量子電磁力学（電子と光子との相互作用）からくる補正を考慮して 2.00231930436 に修正された。

[*3] 電子の電荷は負であるため電子の磁気モーメントはスピンとは反対向きになっている。すなわち電子のスピンが上向きなら，電子を磁石だと考えたときに N 極が下，S 極が上にくる。

[*4] このような周期運動を歳差運動という。スピンの歳差運動は磁気共鳴診断（MRI) に応用されている

25 運動量表示

x 軸上を運動する粒子を考える。波動関数 $\psi(x)$ の Fourier 変換 $\hat{\psi}(p)$ を

$$\hat{\psi}(p) := \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{\mathbb{R}} \psi(x)e^{-ipx/\hbar}dx, \qquad p \in \mathbb{R}$$

で定義する。関数 $\psi(x)$ を関数 $\hat{\psi}(p)$ に移す演算子を $\mathcal{F}$ とする。つまり $\hat{\psi} = \mathcal{F}\psi$。Fourier 変換の理論から $\mathcal{F}$ はユニタリ ($\mathcal{F}^\dagger = \mathcal{F}^{-1}$) であることが知られている（→熱・波動方程式論)。

1. $\hat{p} = -i\hbar d/dx$ に対して，任意の $\psi(x)$ に対して $\mathcal{F}(\hat{p}\psi)(p) = p\hat{\psi}(p)$，$p \in \mathbb{R}$ となることを確認せよ。ψ は任意なので，$\mathcal{F}\hat{p} = p\mathcal{F}$，つまり $\mathcal{F}\hat{p}\mathcal{F}^\dagger = p$ となる[*5]。
2. $|\hat{\psi}(p)|^2$ の物理的な意味は何か？
3. 自然数 n に対して $\mathcal{F}x^n\mathcal{F}^\dagger = (i\hbar\partial_p)^n$ を示せ。さらに任意の関数 $V(x)$ に対して $\mathcal{F}V(x)\mathcal{F}^\dagger = V(i\hbar\partial_p)$ を示せ[*6]。
4. $\psi_t(x)$ がポテンシャル V をもつシュレディンガー方程式に従うとき，$\hat{\psi}_t(p)$ はシュレディンガー方程式

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\hat{\psi}_t(p) = \Big(\frac{p^2}{2m} + V(i\partial_p)\Big)\hat{\psi}_t(p) \tag{4}$$

を満たすことを示せ。

(注意) フーリエ変換された波動関数の空間を運動量空間といい，そこでは運動量演算子は掛け算演算子 p になり，逆に位置演算子 $\hat{x}$ は運動量による微分演算子 $i\hbar\partial_p$ となる。状態や物理量を運動量空間で表現することを運動量表示 (momentum representation) という。これに対して，状態が位置座標 x の関数 $\psi(x)$ で表されるような表示を座標表示という。

26 ユニタリ変換と固有値

$\mathcal{H}, \mathcal{K}$ を内積空間とする。演算子 $U : \mathcal{H} \to \mathcal{K}$ が全単射かつ内積を保存するときユニタリであるという。内積を保存するとは任意の $u, v \in \mathcal{H}$ に対して $\langle u, v\rangle = \langle Uu, Uv\rangle$ となることである。このとき

1. $U^\dagger = U^{-1}$ であることを示せ。
2. H を $\mathcal{H}$ 上の演算子とする。$\mathcal{K}$ 上の演算子を $H' = UHU^{-1}$ と定義する。H が固有値，固有ベクトル E, u を持つとき，E, Uu は H' の固有値・固有ベクトルである事を示せ。
3. $u_t \in \mathcal{H}$ が方程式 $i\hbar\frac{d}{dt}u_t = Hu_t$ を満たすとき，$v_t := Uu_t$ は $i\hbar\frac{d}{dt}v_t = H'v_t$ を満たす事を確かめよ。

27 一様電場中の調和振動子

x 軸上を運動する粒子を考える。粒子はばね定数 k のバネに繋がれていて，x 軸の正の方向に一定の電場 E が加わっている。$E = 0$ のときのバネの釣り合いの位置は $x = 0$ であるとする。

1. ハミルトニアン $\hat{H}$ を書け。ただし，粒子の質量を m，電荷を $-e$ とする。
2. $\hat{H}$ の固有値，固有ベクトルを $E_n, u_n(x)$ とする。$E_0 \le E_1 \le E_2 \le \cdots$。電場が加わっていないとき（$E = 0$）の状態 u_n を $v_n(x)$ とするとき，$u_n(x)$ を $v_n(x)$ を用いて表せ。

28 ヴィリアル定理

ハミルトニアンの規格化された固有ベクトルは束縛状態を表し，固有値はそのときのエネルギーを表す。ハミルトニア

[*5] フーリエ変換した関数の世界の変数は $p \in \mathbb{R}$ であることに注意。
[*6] $V(x)$ はテイラー展開できると考えてよい

ンの固有値,（規格化された）固有ベクトルは常に存在するとは限らない。ここでは斥力型のポテンシャルは粒子を束縛することができないことを証明する。

x 軸上を運動する粒子のハミルトニアンを

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(x), \qquad (p = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x})$$

とする。H の固有値を E_n，規格化された固有関数を $u_n(x)$ とする $(n = 0, 1, 2, \cdots)$

1. λ は実数とし $v_n(x) = N(\lambda)u_n(\lambda x)$ と置く。規格化定数 $N(\lambda)$ を求めよ。
2. v_n に関する H の期待値

   $$\langle v_n, Hv_n\rangle = |N(\lambda)|^2 \int_{\mathbb{R}} \overline{u_n(\lambda x)}(Hu_n)(\lambda x)dx$$

   をこのままの形で、λ で微分して

   $$\left.\frac{d}{d\lambda}\langle v_n, Hv_n\rangle\right|_{\lambda=1} = 0$$

   となることを確かめよ。
3. 問題 2 の積分を $y = \lambda x$ と変数変換してから λ で微分し、2 の結果と比較する事により

   $$2\left\langle u_n, \frac{p^2}{2m}u_n\right\rangle = \left\langle u_n, x\frac{dV}{dx}u_n\right\rangle$$

   となる事を示せ。この関係式を Virial 定理という。(注意) もしポテンシャル V が $x(dV/dx) \leq 0$ を満たすならば上式右辺は負である。しかしそれは左辺は常に正であることに矛盾する。したがって，この場合，H は固有値を持たない。
4. ポテンシャルが

   $$V(x) = V_0 e^{-x^2/a}, \qquad V(x) = \frac{V_0}{a^2 + x^2}, \quad (a > 0)$$

   の形の場合を考える。$V_0 > 0$ のとき H は固有値を持たないことを証明せよ。

29 調和振動子の固有状態に対する行列要素

1 次元調和振動子の第 n 励起状態は $u_n = (n!)^{-1/2}(\hat{a}^\dagger)^n u_0$ と表されることは講義で学んだ。ここに $\hat{a}^\dagger$ は生成演算子，u_0 は規格化された基底状態である。そして，$\{u_n\}_{n=0}^{\infty}$ は完全正規直交系をなすことが知られている。以下の問題を解け。

1. 運動量 $\hat{p}$ 及び位置 $\hat{x}$ を生成消滅演算子 $\hat{a}^\dagger, \hat{a}$ を用いて表せ。
2. $\langle u_n, \hat{p}^2 u_n\rangle, \langle u_n, \hat{x}^2 u_n\rangle$ を計算せよ。その計算結果の物理的意味は何か？
3. 一般に，演算子 $\hat{A}$ に対して，$\left\langle u_n, \hat{A}u_m\right\rangle$ を $\hat{A}$ の $\{u_n\}_n$ に関する行列要素という。演算子 $\hat{A}, \hat{B}$ の行列要素について次の関係式が成り立つ事を示せ

   $$\left\langle u_n, \hat{A}\hat{B}u_m\right\rangle = \sum_{k=0}^{\infty}\left\langle u_n, \hat{A}u_k\right\rangle\left\langle u_k, \hat{B}u_m\right\rangle \tag{5}$$

4. 行列要素 $\langle u_n, \hat{p}u_m\rangle, \langle u_n, \hat{x}u_m\rangle$ を計算せよ。
5. 行列要素 $\langle u_n, \hat{p}\hat{x}u_m\rangle$ を計算せよ。

30 3 次元調和振動子の固有値問題

原点に平衡点を持つ，ばね定数 $k = m\omega^2$ のばねにつながれた粒子を考える。粒子の質量は m である。この系のハミルトニアンは

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}(\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2) + \frac{m\omega^2}{2}(\hat{x}^2 + \hat{y}^2 + \hat{z}^2) \tag{6}$$

で与えられる。この量子系のエネルギーに関する固有値問題 $\hat{H}u = Eu$ を変数分離法で解く。

(1) 関数 X, Y, Z を用いて $u = X(x)Y(y)Z(z)$ と仮定する。このとき X, Y, Z の満たす方程式を書け。

(2) 上で導出した X, Y, Z に関する方程式を解き，固有関数を求めよ。

(3) $\hat{H}$ の固有関数は，(2) で導出したものが全てである事を説明せよ。（固有値の完全性に注目する）

(4) $\hat{H}$ の第 n 励起状態の縮退度（重複度ともいう）はいくつか？ここで縮退度とは固有値に属する（一次独立な）固有ベクトルの数である。

31 Laplacian の極座標表示

3 次元のラプラシアンを極座標で書くと

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2}\left(\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right) \tag{7}$$

$$= \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2}\left(-\frac{\widehat{\mathbf{L}^2}}{\hbar^2}\right) \tag{8}$$

となることを示せ。

32 水素様イオンの固有状態

水素様イオンの定常状態は $u_{nlm}(r,\theta,\phi) = R_{nl}(r)Y_l^m(\theta,\phi)$ と書くことができ，動径方向の関数 R_{nl} は

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0}\frac{1}{r}\right\}R_{nl}(r) = E_n R_{nl}(r) \tag{9}$$

を満たす。そして固有値 E_n は

$$E_n = -\frac{\hbar^2}{2\mu a^2}\frac{1}{n^2}, \qquad a = \frac{4\pi\epsilon_0}{Z}\frac{\hbar^2}{\mu e^2} \tag{10}$$

で与えられることが知られている。

(a) $l = n - 1$ のとき

$$R_{nl}(r) = C\frac{1}{r}\left(\frac{r}{a}\right)^{l+1} e^{-r/na} \tag{11}$$

は (9) を満たすことを確かめよ。また規格化定数 C を求めよ。

(b) $l = n - 1$ のときに，運動エネルギーと位置エネルギーの平均値の間に

$$2\left\langle u_{nlm}, -\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta u_{nlm}\right\rangle = \left\langle u_{nlm}, \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}u_{nlm}\right\rangle \tag{12}$$

が成り立つ事を直接計算で確かめよ。

33 コヒーレント状態

$\hat{a}$ を消滅演算子とする。複素数 α に対して $\hat{a}v_\alpha = \alpha v_\alpha$ を満たすベクトル v_α をコヒーレント状態という。これは，レーザー光の状態を記述するのに用いられる。ここでは v_α の数学的性質を調べる。

(1) u_n を調和振動子の第 n 励起状態とするとき $\langle u_n, v_\alpha\rangle = \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}\langle u_0, v_\alpha\rangle$ を示せ。

(2) $\{u_n\}_{n=0}^{\infty}$ が完全正規直交系であることに注意して，

$$v_\alpha = \langle u_0, v_\alpha\rangle \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} u_n \tag{13}$$

を示せ。

(3) 規格化条件 $\langle v_\alpha, v_\alpha\rangle = 1$ から $1 = |\langle u_0, v_\alpha\rangle|^2 e^{|\alpha|^2}$ となることを示し，規格化された v_α は

$$v_\alpha = e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2 + \alpha\hat{a}^\dagger} u_0 \tag{14}$$

と書けることを示せ。

(4) 複素数 α, β に対して

$$|\langle v_\alpha, v_\beta\rangle|^2 = e^{-|\alpha-\beta|^2} \tag{15}$$

が成り立つ事を示せ。つまり $\alpha \neq \beta$ であっても v_α, v_β は直交しない。

(5) 作用素 T を

$$T = \frac{1}{\pi}\int_{\mathbb{C}} d^2\alpha\, |v_\alpha\rangle\langle v_\alpha| \tag{16}$$

で定義する。つまり状態 ψ に対して T は $T\psi = \pi^{-1}\int_{\mathbb{C}} d^2\alpha \langle v_\alpha, \psi\rangle v_\alpha$ と作用する。また積分は複素数全体にわたるものとする：$\int_{\mathbb{C}} d^2\alpha = \int_{\mathbb{R}} d\Re\alpha \int_{\mathbb{R}} d\Im\alpha$。まず，$\{u_n\}_n$ が完全正規直交系である事に注意して

$$T = \frac{1}{\pi}\int_{\mathbb{C}} d^2\alpha e^{-|\alpha|^2} \sum_{n,m} \frac{\bar{\alpha}^n \alpha^m}{\sqrt{n!m!}} |u_m\rangle\langle u_n| \tag{17}$$

であることを示せ。次に α を極形式 $\alpha = re^{i\phi}$ に変換（$d^2\alpha \to rdrd\phi$）することにより

$$\int d^2\alpha e^{-|\alpha|^2} \bar{\alpha}^n \alpha^m = \pi n! \delta_{m,n} \tag{18}$$

となることを示せ。以上から，T は恒等演算子 I であることをしめせ。