

量子力学 II 定期試験問題 2007/2/8

1

角運動量の合成に関する次の質問に答えよ。

1. 大きさ $l_1\hbar$ と $l_2\hbar$ の 2 種類の角運動量を合成して、 $\hbar$ の整数倍の角運動量が得られるときは、 l_1 と l_2 がどのような値のときか？
2. 大きさ $l_1\hbar$ と $l_2\hbar$ の 2 種類の角運動量を合成して、 $\hbar$ の (整数 $+\frac{1}{2}$) 倍の角運動量が得られるときは、 l_1 と l_2 がどのような値のときか？
3. 二つの素粒子を合成して作った複合粒子がフェルミオンになるときはもとの粒子がどのようなときか？

2

電子の運動エネルギー ($\frac{1}{2}m_e v^2$) は、角運動量の 2 乗を $\hat{L}^2$ とすると次のように表せる。

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e}\Delta = -\frac{\hbar^2}{2m_e}\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}r + \frac{1}{2m_e r^2}\hat{L}^2 \quad (1)$$

また、球面調和関数 $Y_{\ell m}(\theta, \phi)$ は次の固有値方程式を満たす。

$$\hat{L}^2 Y_{\ell m}(\theta, \phi) = \hbar^2 \ell(\ell+1) Y_{\ell m}(\theta, \phi) \quad (2)$$

$$\hat{L}_z Y_{\ell m}(\theta, \phi) = \hbar m Y_{\ell m}(\theta, \phi) \quad (3)$$

いま、 He^+ イオンのある定常状態のエネルギーが E であり、その波動関数が定数 b を使って

$$\psi(r, \theta, \phi) = r^\ell e^{-(r/b)} Y_{\ell m}(\theta, \phi) \quad (4)$$

とあらわされることを仮定して、次の問に答えよ。粒子のスピンは考慮しないものとする。

1. Schrodinger 方程式から、未知数 E と b を求める連立方程式をたてよ。
2. 定数 b とエネルギー E をもとめよ。

3

リチウム原子は原子核が原点にあり、その回りに 3 つの電子が束縛されている系である。その基底状態について考える。水素原子の基底状態のエネルギーは $-\frac{1}{2}\frac{me^4}{\hbar^2}$ である。このことを参考にして、リチウムの基底状態のエネルギーをもとめよ。ただし電子間の反発力は無視し、電子が排他律の適用を受ける (フェルミオンである) ことは考慮すること。また、原子核のスピンは考えなくてもよいとする。

発展問題 4

大きさ $\frac{1}{2}\hbar$ のスピン角運動量の成分 S_x, S_y, S_z は Pauli のスピン行列 $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ をもちいて、次のように表される。

$$\begin{aligned} S_x &= \sigma_x, & S_y &= \sigma_y, & S_z &= \sigma_z \\ \sigma_x &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, & \sigma_y &= \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, & \sigma_z &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (5)$$

1. 交換子 $[S_x, S_y]$ を計算せよ。
2. $(S_x)^2 = (S_y)^2 = (S_z)^2$ となることを示し、この行列をもとめよ。
3. スピンが z 軸の正の方向を向いた状態を

$$\xi_{\uparrow} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (6)$$

で表そう。このスピン状態を x 軸 のまわりに角度 π だけ回転してできる状態をもとめよ。

4. 前問と同じく、このスピン状態を x 軸 のまわりに角度 2π だけ回転してできる状態をもとめよ。
(ヒント) 一般に角運動量演算子を $\hat{J}$ とすると、 x 軸 のまわりの角度 α の空間回転の演算子は次式で表される。

$$R_x(\alpha) = e^{-\frac{i}{\hbar}\alpha\hat{J}_x} \quad (7)$$

量子力学 II 定期試験正解例

解答 1

大きさ $\ell_1\hbar$ と $\ell_2\hbar$ の 2 種類の角運動量を合成すると大きさ

$$|\ell_1 - \ell_2|\hbar, (|\ell_1 - \ell_2| + 1)\hbar, \dots, (\ell_1 + \ell_2)\hbar \quad (8)$$

の全角運動量をもつ状態があらわれる。このことから、

1. $\hbar$ の整数倍の角運動量が得られるときは、 ℓ_1 と ℓ_2 がどちらも整数か、どちらも (整数 $+\frac{1}{2}$) のときである。
2. $\hbar$ の (整数 $+\frac{1}{2}$) 倍の角運動量が得られるときは、 ℓ_1 と ℓ_2 のどちらか一方が整数でもう一方が (整数 $+\frac{1}{2}$) であるときである。
3. Pauli のスピンと統計の関係によると、スピンの大きさが整数の粒子はボゾンになり、(整数 $+\frac{1}{2}$) である粒子はフェルミオンになる。

二つの素粒子を合成して作った複合粒子のスピン (自転) は二つの構成粒子のスピンと相対運動の軌道角運動量を合成したものである。軌道角運動量はいつも整数であるので、全体がスピン (整数 $+\frac{1}{2}$) をもつときはもとの粒子の一方がボゾンで他方がフェルミオンであるときだけである。

解答 2

以下では、混乱の恐れはないから $m_e = m$ とする。また、中心の核の電荷を一般に $+Ze$ としよう。最後に $Z=2$ としたものが解答になる。

1. この系のハミルトン演算子は

$$\hat{H} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r} \quad (9)$$

あたえられた波動関数 $\psi(r, \theta, \phi)$ を Schrodinger 方程式に代入して、

$$\begin{aligned} & (\hat{H} - E)r^\ell e^{-(r/b)} Y_{\ell m}(\theta, \phi) \\ = & \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2mr^2} - \frac{Ze^2}{r} - E \right) r^\ell e^{-(r/b)} Y_{\ell m}(\theta, \phi) = 0 \end{aligned} \quad (10)$$

これから、

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left\{ -\frac{2(\ell+1)}{b} r^{\ell-1} + \frac{1}{b^2} r^\ell \right\} - Ze^2 r^{\ell-1} - Er^\ell = 0 \quad (11)$$

すべての r に対してこれが成り立つことから、 $r^{\ell-1}$ の係数と r^ℓ の係数をそれぞれ 0 とおくと、求める連立方程式がえられる。

$$\frac{\hbar^2(\ell+1)}{mb} - Ze^2 = 0 \quad (12)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2mb^2} - E = 0 \quad (13)$$

2. 連立方程式を b について解いて、

$$b = \frac{\hbar^2(\ell+1)}{mZe^2} \quad (14)$$

E について解いて、

$$E = -\frac{\hbar^2}{2mb^2} = -\frac{m}{2\hbar^2} \frac{(Ze^2)^2}{(\ell+1)^2} \quad (15)$$

解答 3

$E_0 = -\frac{1}{2} \frac{me^4}{\hbar^2}$ を単位として考える。水素原子の主量子数 n のエネルギーは $E_0 \frac{1}{n^2}$ となる。一般的に原子番号を Z とし、その回りの軌道に順々に 3 個の電子が入っていくことを考えよう。

この場合の 1 電子のエネルギー固有値は $-\frac{1}{2} \frac{m(Ze^2)^2}{\hbar^2} \frac{1}{n^2}$ である。したがって基底状態 ($n = 1$) のエネルギーは $Z^2 E_0$ であり、ここにはスピンの自由度を考えると、2 個の電子が入れる。3 番目の電子は $n = 2$ の軌道に入る。この軌道のエネルギーは $Z^2 E_0 \times \frac{1}{4}$ である。したがって 3 個の電子のエネルギーを合計すると、

$$Z^2 E_0 \times 2 + \frac{1}{4} Z^2 E_0 = \frac{9}{4} Z^2 E_0 \quad (16)$$

$Z = 3$ を代入して次の解を得る。

$$\frac{81}{4} E_0 = -\frac{81}{8} \frac{me^4}{\hbar^2} \quad (17)$$

もし $n = 2$ の軌道が LS 結合によって微細構造の 2s と 2p とに分かれることを考慮しても、2p 軌道のエネルギーが上がるだけなので、3 番目の電子は 2s 軌道にはいる。よって結論は変わらない。

解答：発展問題 4

- $[S_x, S_y] = i\hbar S_z$
- $(S_x)^2 = (S_y)^2 = (S_z)^2 = \frac{3}{4} \hbar^2 I$.
ここで I は 2 行 2 列の単位行列。
- スピンの z 軸の負の方向を向くので、

$$\xi_{\downarrow} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (18)$$

の定数倍が答になるのはすぐわかるが、より正確にその定数まで求めるにはつぎの様にしないで

$$R_x(\theta) = e^{-\frac{i}{\hbar} \theta \hat{J}_x} = e^{-\frac{i}{\hbar} \theta S_x} = e^{-\frac{i}{2} \theta \sigma_x} = \cos\left(\frac{1}{2} \theta \sigma_x\right) - i \sin\left(\frac{1}{2} \theta \sigma_x\right) \quad (19)$$

ここで、 $(\sigma_x)^2 = I$ なので、

$$R_x(\theta) = \cos\left(\frac{1}{2} \theta\right) I - i \sigma_x \sin\left(\frac{1}{2} \theta\right) = \begin{pmatrix} \cos(\frac{1}{2} \theta) & -i \sin(\frac{1}{2} \theta) \\ -i \sin(\frac{1}{2} \theta) & \cos(\frac{1}{2} \theta) \end{pmatrix} \quad (20)$$

したがって、

$$R_x(\theta) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos(\frac{1}{2} \theta) \\ -i \sin(\frac{1}{2} \theta) \end{pmatrix} \quad (21)$$

ここで、 $\theta = \pi$ とおいて、次の結果を得る。

$$\begin{pmatrix} 0 \\ -i \end{pmatrix} \quad (22)$$

- 2π だけ回転するのだからもとの状態 $\xi_{\uparrow}$ に戻るかどうか、前問にならって $\theta = 2\pi$ とおいてみよう。その結果、

$$\begin{pmatrix} -1 \\ 0 \end{pmatrix} = -\xi_{\uparrow} \quad (23)$$

となる。このように 360 度の回転で状態関数の符号が変わるのが角運動量 (整数 + $\frac{1}{2}$) をもつ状態の不思議である。