

## — 量子力学第 3 試験問題 — 2001.2.8(13:00-16:00)

I. 1次元の散乱問題を積分方程式の方法で議論しよう。

I.1 散乱ポテンシャルを  $V$  としてハミルトニアンを  $H = H_0 + V$  と書いたとき、

$$\Psi = \Psi_0 + G_0 V \Psi$$

がシュレディンガー方程式  $H\Psi = E\Psi$  を満たすことを全ての演算子を行列として扱い形式的に示せ。ただし  $\Psi_0$  は斉次解 (ポテンシャルのないときの波動関数) であり  $H_0\Psi_0 = E\Psi_0$  を満たし、 $G_0$  はポテンシャルのないときのグリーン関数  $G_0 = (E - H_0)^{-1}$  である。

I.2 [I.1] の積分方程式をある境界条件のもとで書き下すと以下のようなになる。

$$\Psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ikx} - \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right) \frac{i}{2k} \int_{-\infty}^{\infty} dy V(y) e^{ik|x-y|} \Psi(y)$$

ポテンシャルを  $V(x) = -g \frac{\hbar^2}{2m} \delta(x)$  として  $x > 0$  と  $x < 0$  の場合の波動関数を求めよ。

I.3 透過率  $T$  と反射率  $R$  を求めよ。

II. フェルミ粒子の場の演算子を次のように定義する。 ( $\{c_i, c_j^\dagger\} = \delta_{ij}$ )

$$\psi(\vec{r}) = \sum \phi_i(\vec{r}) c_i$$

II.1  $\phi_i(\vec{r})$  は完全系をなすが、これは何を意味するか記述せよ。

II.2 別の完全系  $\tilde{\phi}(\vec{r})$  により  $\tilde{\psi}(\vec{r}) = \sum_i \tilde{\phi}_i(\vec{r}) \tilde{c}_i$  と展開したとき以下の関係式を示せ。

$$[\tilde{c}_i, \tilde{c}_j^\dagger]_{\mp} = \delta_{ij}$$

II.3 2粒子状態  $|2\rangle = c_1^\dagger c_2^\dagger |0\rangle$  に関して相互作用

$$H_i = \frac{1}{2} \int d^3r d^3r' \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}) \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}') v(\vec{r} - \vec{r}') \hat{\psi}(\vec{r}') \hat{\psi}(\vec{r})$$

の期待値を計算しよう。 ( $v(\vec{r}) = v(r)$ )

II.3.1 以下の式をまず示せ。

$$\hat{\psi}(\vec{r}) |2\rangle = \phi_1(\vec{r}) c_2^\dagger |0\rangle - \phi_2(\vec{r}) c_1^\dagger |0\rangle$$

II.3.2 同様に  $\hat{\psi}(\vec{r}')\hat{\psi}(\vec{r})|2\rangle$  を計算せよ。

II.3.3  $\langle 2|H_i|2\rangle$  を計算せよ。ただし  $J, K$  を次のように定義する。

$$J = \int d^3r d^3r' |\phi_1(\vec{r}')|^2 |\phi_2(\vec{r})|^2 v(\vec{r} - \vec{r}')$$

$$K = K^* = \int d^3r d^3r' \phi_1^*(\vec{r}') \phi_2(\vec{r}') \phi_2^*(\vec{r}) \phi_1(\vec{r}) v(\vec{r} - \vec{r}')$$

III. 相互作用の無い電子系での電子配置をまず考えスピンと角運動量を保存する相互作用の効果を摂動論で考える。

III.1 相互作用の無いとき電子配置  $(2p)^1(3p)^1$  の縮退度はいくつか

III.2 多重項の表記  ${}^1D$  とは何を意味するか説明せよ。

III.3 相互作用により電子配置  $(2p)^1(3p)^1$  から生じる多重項を  ${}^{2S+1}L$  の形でその縮退度とともに示せ。

IV. 電荷  $z_j e$ ,  $j = 1, 2, \dots$  を持つ系における1次の過程の光遷移の行列要素  $M_{ba}$  を双極子近似下で考える。

$$M_{ba} = \langle b | \sum_j \frac{i\hbar z_j e}{m} \vec{e}_{k\sigma} \cdot \vec{\nabla}_j | a \rangle = \int \prod d\vec{r}_i \Psi_b^*(\{\vec{r}_i\}) \left( \sum_i \frac{i\hbar z_i e}{m_i} (\vec{e}_{k\sigma} \cdot \vec{\nabla}_i) \right) \Psi_a(\{\vec{r}_i\})$$

ただし  $|a\rangle, |b\rangle$  は粒子系の非摂動系の固有状態

$$H_p |a\rangle = E_a |a\rangle, \quad H_p |b\rangle = E_b |b\rangle$$

であり、粒子系のハミルトニアンは次のとおりである。

$$H_p = - \sum_j \frac{\hbar^2}{2m} \Delta_j + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i < j} \frac{z_i z_j e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|}$$

IV.1

$$[H_p, \vec{r}_j] = -\frac{\hbar^2}{m} \vec{\nabla}_j$$

を導け。

IV.2  $[H_p, \vec{r}_j]$  の状態  $a, b$  間での行列要素を計算し、次の式を示せ。

$$\langle b | \vec{\nabla}_j | a \rangle = \frac{m}{\hbar^2} (E_a - E_b) \langle b | \vec{r}_j | a \rangle$$

IV.3

$$M_{ba} = -i\omega_{ba} \mu^T$$

と書いたとき  $\mu^T$  を求めよ。ただし  $\hbar\omega_{ba} = E_b - E_a$  である。