— 量子力学第３:試験問題 — 2004. 2.5 (9:00—12:00) 初貝

(定義されていない記号等は授業で用いた慣用にしたがって適宜解釈せよ。)

I. 散乱体のポテンシャル $V(\vec{r})$ として散乱の積分方程式は次の通りである。

$$\Psi(\vec{r}) = \Phi(\vec{r}) + \int d^3r'\, G_0(\vec{r}-\vec{r}\,')V(\vec{r}\,')\Psi(\vec{r}\,')$$

ただし $H_0 = -\frac{\hbar^2\Delta}{2m}$、固有エネルギー $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} > 0$ として

$$H_0\Phi(\vec{r}) = E\Phi(\vec{r}), \quad \Phi(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}}e^{ikz}, \quad (E-H_0)G_0(\vec{r}) = \delta(\vec{r})$$

I.1 波動数関 $\Psi(\vec{r})$ が定常状態のシュレディンガー方程式 $(H_0+V)\Psi = E\Psi$ を満たすことを示せ。

I.2 $G_0(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi)^3}\int d^3K\, e^{i\vec{K}\cdot\vec{r}}\hat{G}_0(\vec{K})$ として $\hat{G}_0(\vec{K})$ を求めよ。なお $\delta(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi)^3}\int d^3K\, e^{i\vec{K}\cdot\vec{r}}$ である。

I.3 $k \to k + i0$ として $G_0(\vec{r})$ を求めよ。

I.4 積分方程式を形式的に $\Psi = \Phi + G_0V\Psi$、$G_0^{-1} = E - H_0$ と書いたとき演算子の非可換性に注意して $\Psi = (1-G_0V)^{-1}\Phi$ を導け。.

II. スピン軌道関数を $\bar{\phi}_{j\mu}(\vec{r},\sigma) = \phi_j(\vec{r})\chi_\mu(\sigma)$ $(j = 1, 2\cdots, \mu = \uparrow, \downarrow, \sigma = 1, 2)$ とする.

II.1 $\{\phi_j(\vec{r})\}$ が規格直交化されているための条件を示せ。

II.2 $\{\phi_j(\vec{r})\}$ が完全系をつくるための条件を示せ。

II.3 $\chi_\mu(\sigma)$ が規格直交化されているための条件を示し、その条件を列ベクトル $\boldsymbol{\chi}_\mu =^t (\chi_\mu(1), \chi_\mu(2))$ で書け。

II.4 $\chi_\mu(\sigma)$ が完全系をつくるための条件を示し、その条件を $\boldsymbol{\chi}_\mu$ で書け。

II.5 スピン軌道関数 $\bar{\phi}_{i\mu}, \bar{\phi}_{j\nu}$ の間のクーロン積分 $J(i\mu, j\nu)$, 交換積分 $K(i\mu, j\nu)$ は次のように定義される。($\tau = (\vec{r},\sigma), \tau' = (\vec{r}\,',\sigma')$, $v(\vec{r}) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{1}{|\vec{r}|}$)

$$\begin{aligned} J(i\mu, j\nu) &= \int d\tau \int d\tau'\, |\phi_{i\mu}(\tau)|^2|\phi_{j\nu}(\tau')|^2 v(\vec{r}-\vec{r}\,') \\ K(i\mu, j\nu) &= \int d\tau \int d\tau'\, \bar{\phi}^*_{i\mu}(\tau')\bar{\phi}_{j\nu}(\tau')\bar{\phi}^*_{j\nu}(\tau)\bar{\phi}_{\imath\mu}(\tau)v(\vec{r}-\vec{r}\,') \end{aligned}$$

として $\mu \neq \nu$ の時 $K(i\mu, j\nu) = 0$ を示せ。

II.6 $J(1s\uparrow, 1s\downarrow)$ をを計算せよ。ただし $\phi_{1s} = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}}e^{-r/a}$ であり、$\frac{1}{|\vec{r}-\vec{r}\,'|} = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{r_>}\left(\frac{r_<}{r_>}\right)^n P_n(\cos\theta)$, $\hat{r}\cdot\hat{r}' = \cos\theta$, $\int_{-1}^{1}dx\, P_n(x) = 2\delta_{n0}$ である。

III 多電子系の例として多電子原子のエネルギー準位を考えよう。

III-1 電子配置 $(3d)^2$ の縮退度はいくつか。

III-2 電子間のクーロン相互作用を摂動的に扱い $(3d)^2$ から得られる多重項を求め。状態数が [III-1] と一致することを確認せよ。なお $L = 0, 1, 2, 3, 4, \cdots$ に対して $S, P, D, F, G, \cdots$ と書く。

IV a, b をそれぞれ異るフェルミ粒子の消滅演算子とし 2 種類のフェルミ粒子系のハミルトニアンを $H = \epsilon_a a^\dagger a + \epsilon_b b^\dagger b$、自由エネルギー F を $e^{-\beta F} = \mathrm{Tr}\, e^{-\beta(H-\mu N)}$ とする。ここで β^{-1} は温度、μ は化学ポテンシャル $N = n_a + n_b$, $n_a = a^\dagger a$, $n_b = b^\dagger b$ である。なお真空 $|0\rangle$ は $a|0\rangle = b|0\rangle = 0$, $\langle 0|0\rangle = 1$ を満たす。

IV.1 $n_a^2 = n_a$ を示せ。

IV.2 $e^{-\beta(\epsilon_a-\mu)n_a} = 1 + (e^{-\beta(\epsilon_a-\mu)} - 1)n_a$ を示せ。

IV.3 $|1_a\rangle = a^\dagger|0\rangle$ として $n_a|1_a\rangle$, $n_a|0\rangle$ を計算せよ。

IV.4 $\mathrm{tr_a}\, e^{-\beta(\epsilon_a-\mu)n_a}$ を計算せよ。ただし $\mathrm{tr_a}\, O = \langle 1_a|O|1_a\rangle + \langle 0|O|0\rangle$ である。

IV.5 F をもとめよ。

V 物質の存在しないときの輻射場を一辺 L の立方体中で周期的境界条件のもとでクーロンゲージの下で量子化する。この時、電場 $\vec{E}$ と磁場 $\vec{H}$ は次のように書ける。

$$\vec{E}(\vec{r}) = -\frac{1}{\sqrt{\epsilon_0 L^3}} \sum_{\vec{k},\sigma=1,2} p_{\vec{k}\sigma} \vec{e}_{\vec{k}\sigma} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}}, \qquad \vec{H}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{\epsilon_0 L^3}} \sum_{\vec{k},\sigma=1,2} q_{\vec{k}\sigma} i\vec{k} \times \vec{e}_{\vec{k}\sigma} e^{+i\vec{k}\cdot\vec{r}}$$

ここで $[q_{\vec{k}\sigma}, p_{\vec{k}'\sigma'}] = i\hbar\delta_{\vec{k}\vec{k}'}\delta_{\sigma\sigma'}$ さらに $\vec{e}_{\vec{k}0} = \hat{k} = \vec{k}/|\vec{k}|$, $\vec{e}_{\vec{k}1}$, $\vec{e}_{\vec{k}2}$ は規格直交化された完全系を作り、$\vec{e}_{\vec{k}\sigma} = \vec{e}_{-\vec{k}\sigma}$ とする。

V.1 周期的境界条件から許されるベクトル $\vec{k}$ について説明せよ。

V.2 以下のように定義されるハミルトニアン $\mathcal{H}$ を計算せよ。ただし $\epsilon_0\mu_0 c^2 = 1$ である。

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2}\int d^3r \left(\epsilon_0 \vec{E}^2 + \frac{1}{\mu_0}\vec{H}^2\right)$$

V.3 $a_{\vec{k}\sigma}$ を波数 $\vec{k}$、偏光 σ の光子の消滅演算子としたときこれら演算子の満たす関係式を書け。また光子はボーズ粒子かフェルミ粒子か述べよ。

V.4 次の定義式を用いて、まず $p_{\vec{k}\sigma}, q_{\vec{k}\sigma}$ の間の交換関係を確認し、つぎにハミルトニアンを書き直せ。

$$q_{\vec{k}\sigma} = \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_k}}(a^\dagger_{-\vec{k}\sigma} + a_{\vec{k}\sigma}), \qquad p_{\vec{k}\sigma} = i\sqrt{\frac{\hbar\omega_k}{2}}(a^\dagger_{\vec{k}\sigma} - a_{-\vec{k}\sigma})$$