— 量子力学第 3 問題: (多粒子系の量子力学) —

1 フェルミ粒子、ボーズ粒子それぞれについて $|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}(a^\dagger)^n|0\rangle$, $[a, a^\dagger]_\mp = 1$ としたとき、

i $\langle n|n\rangle = 1$ をフェルミ粒子の場合に示せ。

ii $\langle n|n\rangle = 1$ をボーズ粒子の場合に示せ。(まず $[a, a^{\dagger n}]_-$ を n についての帰納法で計算せよ。)

iii $H = \epsilon a^\dagger a$ としたとき $|n\rangle$ が固有状態であることを示しそのエネルギーを求めよ。

iv $A(x), B(y), C(z)$ は 1 次元の規格直交系をなすとして

$$\tilde{\Phi}_F(x,y,z) = \det \begin{pmatrix} A(x) & B(x) & C(x) \\ A(y) & B(y) & C(y) \\ A(z) & B(z) & C(z) \end{pmatrix}$$

に対して $\int\int\int dxdydz\, |\tilde{\Phi}_F(x,y,z)|^2$ を計算せよ。

v 同じ仮定のもとで

$$\tilde{\Phi}_B(x,y,z) = \sum_{P \text{ of } (\text{x,y,z})} A(Px)A(Py)B(Pz)$$

を書き下し $\int\int\int dxdydz\, |\tilde{\Phi}_B(x,y,z)|^2$ を計算せよ。

2 **i** 質量 m の自由粒子系に一辺 L の立方体中で周期的境界条件を課したとき $L \to \infty$ で、規格直交化された固有状態が次の完全系の条件を満たすことをしめせ。

$$\sum_i \phi_i(\vec{r})\phi_i^*(\vec{r}) = \delta(\vec{r} - \vec{r}')$$

ii 一般の完全系 $\phi_i(\vec{r})$ に対して対応するフェルミ粒子、ボーズ粒子の消滅演算子 c_i, $([c_i, c_j^\dagger[_\mp = \delta_{ij})$ から場の演算子を $\psi(\vec{r}) = \sum \phi_i(\vec{r})c_i$ と構成する。

$$[\psi(\vec{r}), \psi^\dagger(\vec{r})]_\mp = \delta(\vec{r} - \vec{r}')$$

を示せ。

iii 同じ場の演算子を別の完全系 $\tilde{\phi}(\vec{r})$ と対応する消滅演算子 $\tilde{c}_i$ により $\psi(\vec{r}) = \sum_i \tilde{\phi}_i(\vec{r})\tilde{c}_i$ と展開したとき

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

を示せ。

3 フェルミ粒子系に対して以下の設問に答えよ。ただし $\psi(\vec{r}) = \sum_j \phi_j(\vec{r})c_j$, ϕ_j : 規格直交系 とせよ。

i

$$\begin{aligned} |\vec{r}_A, \vec{r}_B\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2!}}\psi^\dagger(\vec{r}_A)\psi^\dagger(\vec{r}_B)|0\rangle \\ |G\rangle &= c_1^\dagger c_2^\dagger|0\rangle \end{aligned}$$

に関して $\Psi(\vec{r}_A, \vec{r}_B) = \langle \vec{r}_A, \vec{r}_B|G\rangle$ を具体的に求めよ。

ii

$$\rho_{\mathrm{I}}(\vec{R}; \vec{r}_A, \vec{r}_B) = \sum_{\alpha=A,B} \delta(\vec{R} - \vec{r}_\alpha) = \delta(\vec{R} - \vec{r}_A) + \delta(\vec{R} - \vec{r}_B)$$

として

$$\int d\vec{r}_A d\vec{r}_B \, \rho_{\mathrm{I}}(\vec{R}; \vec{r}_A, \vec{r}_B)|\Psi(\vec{r}_A, \vec{r}_B)|^2$$

を計算せよ。

iii

$$\rho_{\mathrm{II}}(\vec{R}) = \int d\vec{r} \, \psi^\dagger(\vec{r})\delta(\vec{R} - \vec{r})\psi(\vec{r})$$

として

$$\langle G|\rho_{\mathrm{II}}(\vec{R})|G\rangle$$

を計算せよ。

4 交換積分 K とクーロン積分 J について考えよう。

$$\begin{aligned} K(1,2) &= \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\int d\vec{r}\int d\vec{r}\,' \frac{\phi_1^*(\vec{r}\,')\phi_2(\vec{r}\,')\phi_2^*(\vec{r})\phi_1(\vec{r})}{|\vec{r} - \vec{r}\,'|} \\ J(1,2) &= \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\int d\vec{r}\int d\vec{r}\,' \frac{|\phi_1(\vec{r}\,')|^2|\phi_2(\vec{r})|^2}{|\vec{r} - \vec{r}\,'|} \end{aligned}$$

i $\dfrac{e^{-\mu r}}{r}$ ($\mu \to 0$) をフーリエ展開して
$\dfrac{1}{r} = \dfrac{1}{V}\sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}\dfrac{4\pi}{k^2}$ を示せ。

ii $K(1,2) \geq 0$ を示せ。

iii として $J(1,2) \geq K(1,2)$ を示せ。

5 質量 m の自由なフェルミ粒子系を 1 辺 L の周期的境界条件下で考える ($V = L^3$)。ただし電気的中性の条件を満たすため一様な正電荷 (密度 $\rho_+ = N/V$, N: フェルミ粒子数) の下にあるとする。このとき場の演算子 $\psi(\vec{r}) = \sum_k \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} c_k$ として

$$|F\rangle \;=\; \prod_{\epsilon_k \leq \epsilon_F} c_k^\dagger |0\rangle$$

を Fermi Sea と呼ぶ。$\vec{k} = \frac{2\pi}{L}(n_x, n_y, n_z), n_x, n_y, n_z$ は整数。

i 次の関係式を示せ。

$$\hat{N} = \int dV_r\, \hat{n}(\vec{r}) = \sum_k c_k^\dagger c_k$$
$$\hat{n}(\vec{r}) = \psi^\dagger(\vec{r})\psi(\vec{r})$$

ii $\langle F|\hat{N}|F\rangle$ を求めよ。

iii Fermi Sea の運動エネルギー $\langle F|(-)\dfrac{\hbar\Delta}{2m}|F\rangle$ を求めよ。

iv $\langle F|\hat{n}(\vec{r},\vec{r}\,')|F\rangle$ を求めよ。($\hat{n}(\vec{r},\vec{r}\,') = \hat{n}(\vec{r})\hat{n}(\vec{r}\,') - \delta(\vec{r}-\vec{r}\,')\hat{n}(\vec{r})$)

v ハートリーフォック方程式を考え、クーロン項が正電荷とのポテンシャル項と打ち消すことを示せ。

vi Fermi Sea がハートリーフォック方程式の解であることを示せ。

6 電子番号 Z の水素類似原子の $(1s)$ 軌道の波動関数は

$$\psi_{1s}(\vec{r}) = Ce^{-Zr/a_0}$$

とあたえられる。

i 規格化定数 C を求め、波動関数の Z 依存性を物理的に議論せよ。

ii 次のクーロン積分 $J(1s,1s)$ を求めよう。

$$J(1s,1s) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\int d^3r \int d^3r' \,\frac{1}{|\vec{r}-\vec{r}'|}|\psi_{1s}(\vec{r})|^2|\psi_{1s}(\vec{r}')|^2$$

A

$$\frac{1}{|\vec{r}-\vec{r}'|} = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{r_>}\left(\frac{r_<}{r_>}\right)^n P_n(\cos\theta), \quad \hat{r}\cdot\hat{r}' = \cos\theta$$

を用いて

$$J = \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\int d^3r\, e^{-2\alpha r} 4\pi\left\{\frac{1}{r}\int_0^r dr'\, r'^2 e^{-2\alpha r'} + \int_r^\infty dr'\, r' e^{-2\alpha r'}\right\}, \quad \alpha = \frac{Z}{a_0}$$

を示せ。ただし $\int_{-1}^{1} dx\, P_n(x) = 2\delta_{n0}$ である。

B $J(1s,1s)$ をもとめよ。

7 相互作用しない 多粒子系の量子統計力学について議論しよう。

i フェルミ粒子の消滅演算子を $\hat{c}$, 粒子数演算子 $\hat{n} = \hat{c}^\dagger\hat{c}$ としたとき

$$\begin{aligned} e^{-\beta\epsilon\hat{n}} &= \sum_{j=0}^{\infty}\frac{(-\beta\epsilon)^j}{j!}\hat{n}^j \\ &= 1 + (e^{-\beta\epsilon}-1)\hat{n} \end{aligned}$$

を示せ。

ii 続いてフェルミ粒子の場合

$$\mathrm{Tr} e^{-\beta\epsilon\hat{n}} = \langle 0|e^{-\beta\epsilon\hat{n}}|0\rangle + \langle 1|e^{-\beta\epsilon\hat{n}}|1\rangle = 1 + e^{-\beta\epsilon}$$

を示せ。

iii ボーズ粒子の消滅演算子を $\hat{c}$, 粒子数演算子 $\hat{n} = \hat{c}^\dagger\hat{c}$ としたとき

$$e^{-\beta\epsilon\hat{n}} = \sum_{j=0}^{\infty}\frac{(-\beta\epsilon)^j}{j!}\hat{n}^j \text{ より}$$

$$\begin{aligned} \mathrm{Tr} e^{-\beta\epsilon\hat{n}} &= \sum_{i=0}^{\infty}\langle i|e^{-\beta\epsilon\hat{n}}|i\rangle = \sum_{i=0}^{\infty}\sum_{j=0}^{\infty}\frac{(-\beta\epsilon)^j}{j!}\hat{i}^j \\ &= \sum_{i=0}^{\infty} e^{-\beta\epsilon i} = (1-e^{-\beta\epsilon})^{-1} \end{aligned}$$

を示せ。

iv 第二量子化のもとでハミルトニアンは次のようにあたえられることに注意し

$$H = \int d^3r\, \psi(\vec{r}) \frac{-\hbar^2 \Delta}{2m} \psi(\vec{r})$$

A 1 辺 L, 体積 V の箱の中で周期的境界条件を課し場の演算子を次のように展開した表式

$$\psi(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_k e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} c_k$$

を用いて次の式を導け。

$$H = \sum_k \epsilon_k c_k^\dagger c_k, \quad \epsilon_k = \frac{\hbar k^2}{2m}$$

B 大分配関数 $\mathrm{Tr} e^{-\beta(H-\mu N)} = e^{-\beta(F-\mu N)}$ を計算し自由エネルギー $F(\beta, \mu)$ が次のようになることを示せ。

$$F = \mu N \mp \frac{1}{\beta} \sum_k \log(1 \pm e^{-\beta(\epsilon_k - \mu)})$$

複号の上がフェルミ粒子系、下がボーズ粒子系である。

8 1 次元固体中のスピンを持たない電子系を考えよう。

i 電子系の場の演算子が i サイトの ワニエ関数 $w_i(\vec{r})$ を用いて

$$\psi(\vec{r}) = \sum_i w_i(\vec{r}) c_i, \quad \int d^3r\, w_i^*(\vec{r}) w_j(\vec{r}) = \delta_{ij}$$

とかけているとき、($\{\psi(\vec{r}), \psi^\dagger(\vec{r})\} = \delta(\vec{r} - \vec{r}')$)

$$\{c_i^\dagger, c_j\} = \delta_{ij}$$

をしめせ。

ii 固体中の 1 電子ハミルトニアン $h(\vec{r})$ に関して

$$\int d^3r\, w_i^*(\vec{r}) h(\vec{r}) w_j(\vec{r}) = \begin{cases} -\epsilon_0, & i = j \\ -t, & |i - j| = 1 \\ 0, & \text{それ以外} \end{cases}$$

のとき第二量子化したハミルトニアン $H = \int d^3r\, \psi^\dagger(\vec{r}) h(\vec{r}) \psi(\vec{r})$ が次のようになることを示せ。

$$H = \sum_j \{-t(c_{j+1}^\dagger c_j + c_j^\dagger c_{j+1}) - \epsilon_0 c_j^\dagger c_j\}$$

iii 系に周期的境界条件 $c_{j+N} = c_j$ をおき

$$c_j = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{ikj} c(k)$$

としたとき許される k の値を求め、また次の関係式をしめせ。

$$\{c(k), c^\dagger(k')\} = \delta_{kk'}$$

iv ハミルトニアンが次のようになることをしめせ。

$$H = \sum_k \epsilon(k) c^\dagger(k) c(k)$$

$$\epsilon(k) = -\epsilon_0 - 2t\cos k$$

9 いくつかの多重項を具体的に求めよう。

i 電子配置 $p^1 d^1$ について考えよう。

A 全多重度を求めよ。

B 多重項が ${}^3F, {}^3D, {}^3P, {}^1F, {}^1D, {}^1P$ となることを示せ。

C 多重度が一致することを確認せよ

D フント則により基底状態を与える多重項を指定しその多重項の第一量子化による波動関数を一つ書き下せ。

ii 電子配置 d^2 について考えよう。

A 全多重度を求めよ。

B 多重項が ${}^3F, {}^3P, {}^1G, {}^1D, {}^1S$ となることを示せ。

C 多重度が一致することを確認せよ

D フント則により基底状態を与える多重項を指定しその多重項の第一量子化による波動関数を一つ書き下せ。

10 次のようなハミルトニアンを持つフェルミ粒子系について考えよう。

$$H = -V(ab + b^\dagger a^\dagger), \quad V : \mathrm{real}$$

$$\{a, a^\dagger\} = \{b, b^\dagger\} = 1$$

$$\{a, a\} = \{b, b\} = \{a, b\} = 0$$

$$\{a, b^\dagger\} = \{a^\dagger, b\} = 0$$

i 次の α, β がフェルミ粒子の反交換関係を満たすことを示せ。[1]

$$\alpha = \frac{1}{\sqrt{2}}(a^\dagger + b)$$
$$\beta = \frac{1}{\sqrt{2}}(a - b^\dagger)$$

ii ハミルニアンを α, β で書け。[2]

iii 系の規格化された全固有状態は次の 4 状態となるがその固有エネルギーを示し (エネルギーの最も小さい) 基底状態 $|G\rangle$ をもとめよ。

$$|\tilde{0}\rangle$$
$$|1_\alpha\rangle = \alpha^\dagger|\tilde{0}\rangle$$
$$|1_\beta\rangle = \beta^\dagger|\tilde{0}\rangle$$
$$|1_\alpha 1_\beta\rangle = \alpha^\dagger\beta^\dagger|\tilde{0}\rangle$$

ただし

$$\alpha|\tilde{0}\rangle = \beta|\tilde{0}\rangle = 0$$

iv

$$|\tilde{0}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\Big(|0\rangle + a^\dagger b^\dagger|0\rangle\Big)$$

を確認せよ。ただし $a|0\rangle = b|0\rangle = 0$ である. [3]

v 次の関係式を導け。[4]

$$\langle G|a^\dagger a|G\rangle = \langle G|b^\dagger b|G\rangle = \frac{1}{2}$$

11 2 次元調和振動子ポテンシャルに閉じ込められた電子系を考えよう．電子間のクーロン斥力は十分弱く摂動として取り込めると考えよう。(m は電子の質量，e は電荷

i 束縛ポテンシャルを $V(\vec{r}) = \frac{1}{2}m\omega^2 r^2$ とし ($\vec{r} = (x, y)$) 定常状態の波動関数をまず求めよう。

ハミルトニアン H はつぎのような 2 つの調和振動子 H_x と H_y の和となる。

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right) + V(\vec{r}) = H_x + H_y$$
$$H_x = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2, \qquad H_y = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 y^2$$

このとき 1 粒子状態の波動関数 $\varphi(\vec{r})$ は $\varphi(\vec{r}) = X(x)Y(y)$ と変数分離型にかけることに注意せよ。

A まず固有方程式 $H_x X = E_x X$ をみたす固有関数 X と固有値 E_x を求めることを考える．$D_x = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x + \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\frac{\partial}{\partial x}$, $D_x^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x - \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\frac{\partial}{\partial x}$ として $[D_x, D_x^\dagger] = D_x D_x^\dagger - D_x^\dagger D_x = 1$ を示せ．[5]

B $H_x = \hbar\omega(D_x^\dagger D_x + \frac{1}{2})$ を示せ．[6]

C ここで $D_x X_0(x) = 0$, $\int_{-\infty}^{\infty} dx\, |X_0(x)|^2 = 1$ により定められる $X_0(x)$ を求めよ．

D これらの事実をから H_x の規格直交化された固有状態は

$$X_{n_x}(x) = \frac{1}{\sqrt{n_x!}}(D_x^\dagger)^{n_x} X_0(x), \quad (n_x = 0, 1, 2, \cdots)$$

であたえられ，その固有エネルギーは $E_x^{n_x} = \hbar\omega(n_x + \frac{1}{2})$ となることを示せ。

[7]

E H_y についても同様に考え固有関数 $Y_{n_y}(y)$, 固有値 $E_{n_y} = \hbar\omega(n_y + \frac{1}{2})$, $n_y = 0, 1, 2, \cdots$ としたとき全系の 1 粒子エネルギーは 2 つの非負の整数 (n_x, n_y) で指定される．この全系の 1 粒子エネルギー $E_{(n_x, n_y)}$ とその縮退度をもとめよ．[8]

ii このポテンシャルに電子が 4 個束縛されているときの多電子系の電子状態を電子間のクーロン相互作用 $U(\vec{r} - \vec{r}\,') = \frac{e^2}{4\pi\epsilon}\frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}\,'|}$ を摂動論により電子のスピンを考慮して考えよう．

A クーロン相互作用がないときこの系の基底状態の縮退度を求めよ。

[9]

B これらの縮退した状態を全スピンにより分類せよ。[10]

[11]

C 1 粒子状態 i, j $(i, j = (n_x, n_y))$ の間のクーロン積分 J，交換積分 K を

$$J(i;j) = \frac{e^2}{4\pi\epsilon}\int d^3r \int d^3r'\, \frac{|\varphi_i(\vec{r})|^2 |\varphi_j(\vec{r}\,')|^2}{|\vec{r} - \vec{r}\,'|}$$
$$K(i;j) = \frac{e^2}{4\pi\epsilon}\int d^3r \int d^3r'\, \frac{\varphi_i(\vec{r})\varphi_j^*(\vec{r})\varphi_i^*(\vec{r}\,')\varphi_j(\vec{r}\,')}{|\vec{r} - \vec{r}\,'|}$$

と定義しスピン 3 重項のエネルギーを $S_z = 1$ の状態で評価して求

めよ。なお対称性と一般論より

$$
\begin{aligned}
J((0,1);(0,1)) =& J((1,0);(1,0)) \equiv J' \\
J((0,1);(1,0)) =& J((1,0);(0,1)) \equiv J \\
K((0,1);(1,0)) =& K((1,0);(0,1)) \equiv K \\
J \geq & K \geq 0
\end{aligned}
$$

である.

12

D つぎにスピン 1 重項に関してエネルギーを求めよ。

13

Notes

1

$$\begin{aligned}\{\alpha,\alpha^\dagger\} =&\frac{1}{2}\{a^\dagger,a\}+\frac{1}{2}\{b,b^\dagger\}=1\\ \{\alpha,\beta\} =&\frac{1}{2}\{a^\dagger,a\}-\frac{1}{2}\{b,b^\dagger\}=0\end{aligned}$$

2

$$\begin{aligned}a^\dagger =&\frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha+\beta^\dagger)\\ b =&\frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha-\beta^\dagger)\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}H =&-\frac{V}{2}\left((\alpha^\dagger+\beta)(\alpha-\beta^\dagger)+(\alpha^\dagger-\beta)(\alpha+\beta^\dagger)\right)\\ =&-V\alpha^\dagger\alpha+V\beta\beta^\dagger\\ =&-V\alpha^\dagger\alpha-V\beta^\dagger\beta+V\end{aligned}$$

3

$$\begin{aligned}\alpha|\tilde{0}\rangle =&\frac{1}{\sqrt{2}}\left(a^\dagger|0\rangle+ba^\dagger b^\dagger|0\rangle\right)\\ =&\frac{1}{\sqrt{2}}\left(a^\dagger|0\rangle-a^\dagger bb^\dagger|0\rangle\right)\\ =&\frac{1}{\sqrt{2}}\left(a^\dagger|0\rangle-a^\dagger|0\rangle\right)=0\\ \beta|\tilde{0}\rangle =&\frac{1}{\sqrt{2}}\left(aa^\dagger b^\dagger|0\rangle-b^\dagger|0\rangle\right)\\ =&\frac{1}{\sqrt{2}}\left((-a^\dagger a+1)b^\dagger|0\rangle-b^\dagger|0\rangle\right)=0\end{aligned}$$

4

$$\begin{aligned}|G\rangle =&a^\dagger b^\dagger|\tilde{0}\rangle\\ =&\frac{1}{\sqrt{2}}a^\dagger b^\dagger|0\rangle\end{aligned}$$

より従う。

5

$$
\begin{aligned}
H\varphi =&(H_x + H_y)X(x)Y(y) = (H_x X)Y + X(H_y Y) \\
=&E_x XY + XE_y Y = (E_x + E_y)XY
\end{aligned}
$$

より $E = E_x + E_y$.

f を x の任意の関数として

$$
\begin{aligned}
[D_x, D_x^\dagger]f =&D_x(D_x^\dagger f) - D_x^\dagger(D_x f) \\
D_x(D_x^\dagger f) =&D_x\left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}xf - \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\frac{\partial f}{\partial x}\right) \\
=&\frac{m\omega}{2\hbar}x^2 f - \frac{1}{2}x\frac{\partial f}{\partial x} + \frac{1}{2}\frac{\partial(xf)}{\partial x} - \frac{\hbar}{2m\omega}\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \\
D_x^\dagger(D_x f) =&D_x^\dagger\left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}xf + \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\frac{\partial f}{\partial x}\right) \\
=&\frac{m\omega}{2\hbar}x^2 f + \frac{1}{2}x\frac{\partial f}{\partial x} - \frac{1}{2}\frac{\partial(xf)}{\partial x} - \frac{\hbar}{2m\omega}\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \\
[D_x, D_x^\dagger] =&-x\frac{\partial f}{\partial x} + \frac{\partial(xf)}{\partial x} = f
\end{aligned}
$$

6 D_x, $D_x^\dagger$ を x, $\frac{\partial}{\partial x}$ について解いて

$$
\begin{aligned}
x =&\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(D_x + D_x^\dagger) \\
\frac{\partial}{\partial x} =&\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}(D_x - D_x^\dagger)
\end{aligned}
$$

これから

$$
\begin{aligned}
H_x =&-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \\
=&-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{m\omega}{2\hbar}(D_x - D_x^\dagger)^2 + \frac{1}{2}m\omega^2\frac{\hbar}{2m\omega}(D_x + D_x^\dagger)^2 \\
=&-\frac{\hbar\omega}{4}(D_x - D_x^\dagger)^2 + \frac{\hbar\omega}{4}(D_x + D_x^\dagger)^2 \\
=&\frac{\hbar\omega}{4}(D_x D_x^\dagger + D_x^\dagger D_x + D_x D_x^\dagger + D_x^\dagger D_x) \\
=&\frac{1}{2}\hbar\omega(D_x D_x^\dagger + D_x^\dagger D_x) \\
=&\frac{1}{2}\hbar\omega(2D_x^\dagger D_x + 1) = \hbar\omega(D_x^\dagger D_x + \frac{1}{2})
\end{aligned}
$$

[7]

$$D_x X_0 = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} x X_0 + \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \frac{\partial X_0}{\partial x} = 0$$

より

$$X_0' = -\frac{m\omega}{\hbar} x X_0$$

よって

$$X_0(x) = C e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$$

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{\infty} dx\, |X_0(x)|^2 =& C^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx\, e^{-\frac{m\omega}{\hbar}x^2} = C^2 \sqrt{\frac{\pi\hbar}{m\omega}} = 1 \\ C =& \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \\ X_0(x) =& \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}\end{aligned}$$

[8] (1-3) 解答例
２つの独立な調和振動子の和だからエネルギーはそれぞれの固有エネルギーの和であたえられ

$$\begin{aligned}E_{(n_x,n_y)} =& \hbar\omega(n_x + \frac{1}{2}) + \hbar\omega(n_y + \frac{1}{2}) \\ =& \hbar\omega(n_x + n_y + 1)\end{aligned}$$

となり，これは $n_x + n_y$ が等しければ縮退していて $n_x \geq 0, n_y \geq 0$ より

$$\begin{aligned}E_n =& E_{(n_x,n_y)} = \hbar(n+1), \\ n =& n_x + n_y = 0, 1, 2, \cdots\end{aligned}$$

に対して

$$(n_x, n_y) = (0, n), (1, n-1), \cdots, (n, 0)$$

の n 個が独立な固有関数をあたえるから

$$E_n \text{の縮退度は}\, n+1$$

[9] (3-2) 解答例
スピンを考えて１粒子状態を $\uparrow_{(n_x,n_y)}, \downarrow_{(n_x,n_y)}$ と指定すれば 4 粒子系の基底状態は

最低エネルギーの 1 粒子状態 $(0,0)$ にパウリの排他律を満たすように $\uparrow, \downarrow$ の 2 電子を入れ

$$(0,0)^{\uparrow}(0,0)^{\downarrow}$$

最低エネルギーのつぎの 1 粒子エネルギーをもつ縮退した 2 つの状態 $(0,1)$, $(1,0)$, にスピンを考えて 2 つ電子を収容するから ${}_4C_2 = 6$ とおりの状態が縮退する．具体的には

$$\begin{aligned}
&(0,0)^{\uparrow}(0,0)^{\downarrow} + (0,1)^{\uparrow}(0,1)^{\downarrow} \\
&\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad --- \\
&(0,0)^{\uparrow}(0,0)^{\downarrow} + (1,0)^{\uparrow}(1,0)^{\downarrow} \\
&\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad --- \\
&(0,0)^{\uparrow}(0,0)^{\downarrow} + (0,1)^{\uparrow}(1,0)^{\uparrow} \\
&(0,0)^{\uparrow}(0,0)^{\downarrow} + (0,1)^{\uparrow}(1,0)^{\downarrow} \\
&(0,0)^{\uparrow}(0,0)^{\downarrow} + (0,1)^{\downarrow}(1,0)^{\uparrow} \\
&(0,0)^{\uparrow}(0,0)^{\downarrow} + (0,1)^{\downarrow}(1,0)^{\downarrow}
\end{aligned}$$

の 6 状態である。

[10] 相互作用はスピンに依存しないので全スピンは保存する．そこで縮退する 6 状態を全スピンの z 成分で分類すれば

$$\begin{aligned}
(0,0)^{\uparrow}(0,0)^{\downarrow} + (0,1)^{\uparrow}(0,1)^{\downarrow} &\to S_z = 0 \\
(0,0)^{\uparrow}(0,0)^{\downarrow} + (1,0)^{\uparrow}(1,0)^{\downarrow} &\to S_z = 0 \\
(0,0)^{\uparrow}(0,0)^{\downarrow} + (0,1)^{\uparrow}(1,0)^{\uparrow} &\to S_z = 1 \\
(0,0)^{\uparrow}(0,0)^{\downarrow} + (0,1)^{\uparrow}(1,0)^{\downarrow} &\to S_z = 0 \\
(0,0)^{\uparrow}(0,0)^{\downarrow} + (0,1)^{\downarrow}(1,0)^{\uparrow} &\to S_z = 0 \\
(0,0)^{\uparrow}(0,0)^{\downarrow} + (0,1)^{\downarrow}(1,0)^{\downarrow} &\to S_z = -1
\end{aligned}$$

となるから，１つの 3 重項と 3 つの 1 重項が含まれることがわかる．ここで (フント則) により $S = 1$ の 3 重項が新しい基底状態であり，3 重に縮退すると考えられる．補足すれば，３重項はスピン関数が対称で軌道関数が反対称であるために粒子間の空間座標が近づいたときの確率振幅が小さくクーロンエネルギー的に有利であると考えられる

[11] 相互作用はスピンによらないため全スピンは保存することを考慮し縮退した６状態の基底をつぎのようにとり直す.

(閉殻以外を書いて) 全スピン $S=1$ の 3 重項 $\Psi(S=1)$

$$\begin{aligned} &|(0,1)^{\uparrow}(1,0)^{\uparrow}\rangle \\ \frac{1}{\sqrt{2}}(&|(0,1)^{\uparrow}(1,0)^{\downarrow}\rangle + |(0,1)^{\uparrow}(1,0)^{\downarrow}\rangle) \\ &|(0,1)^{\downarrow}(1,0)^{\uparrow}\rangle \end{aligned}$$

および対応した 1 重項 $\Psi(S=0)$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|(0,1)^{\uparrow}(1,0)^{\downarrow}\rangle - |(0,1)^{\uparrow}(1,0)^{\downarrow}\rangle)$$

さらに 2 つの 1 重項 $\Psi'(S=0)$

$$\begin{aligned} \Psi'(1,0) =& |(1,0)^{\uparrow}(1,0)^{\downarrow}\rangle \\ \Psi'(0,1) =& |(0,1)^{\uparrow}(0,1)^{\downarrow}\rangle \end{aligned}$$

[12] 全スピンのことなる 3 重項は他の基底と電子間相互作用に関する行列要素を持たず，エネルギーは ($S_z=1$ の状態で評価して)

$$E(\Psi(S=1)) = J - K$$

となる.

[13] つぎに 3 つの 1 重項に関して具体的に相互作用ハミルトニアンの行列要素を書き下すことを考えよう．まず,

$$\begin{aligned} \psi_{\sigma}(\vec{r}) =& \sum_{\mu=\uparrow,\downarrow} \sum_{j=(n_x,n_y)} \chi_{\mu}(\sigma)\varphi_j(\vec{r})c_{j\sigma} \\ =& \chi_{\uparrow}(\sigma)\chi_{(0,0)}(\vec{r})c_{(0,0),\uparrow} + \chi_{\downarrow}(\sigma)\chi_{(0,0)}(\vec{r})c_{(0,0),\downarrow} \\ &+ \chi_{\uparrow}(\sigma)\chi_{(1,0)}(\vec{r})c_{(1,0),\uparrow} + \chi_{\downarrow}(\sigma)\chi_{(1,0)}(\vec{r})c_{(1,0),\downarrow} \\ &+ \chi_{\uparrow}(\sigma)\chi_{(0,1)}(\vec{r})c_{(0,1),\uparrow} + \chi_{\downarrow}(\sigma)\chi_{(0,1)}(\vec{r})c_{(0,1),\downarrow} + \cdots \end{aligned}$$

として第 1 量子化の波動関数を求めると (閉殻を無視して)

$$\begin{aligned} \Psi'_{(1,0)}(\vec{r}_1,\sigma_1;\vec{r}_2,\sigma_2) =& \frac{1}{\sqrt{2}}\langle 0|\psi_{\sigma_1}(\vec{r}_1)\psi_{\sigma_2}(\vec{r}_2)c^{\dagger}_{(1,0)\uparrow}c^{\dagger}_{(1,0)\downarrow}|0\rangle \\ =& \frac{1}{\sqrt{2}}\big(\varphi_{(1,0)}(\vec{r}_1)\chi_{\uparrow}(\sigma_1)\varphi_{(1,0)}(\vec{r}_2)\chi_{\downarrow}(\sigma_2) - \varphi_{(1,0)}(\vec{r}_1)\chi_{\downarrow}(\sigma_1)\varphi_{(1,0)}(\vec{r}_2)\chi_{\uparrow}(\sigma_2)\big) \\ =& \varphi_{(1,0)}(\vec{r}_1)\varphi_{(1,0)}(\vec{r}_2)\frac{1}{\sqrt{2}}(\chi_{\uparrow}(\sigma_1)\chi_{\downarrow}(\sigma_2) - \chi_{\downarrow}(\sigma_1)\chi_{\uparrow}(\sigma_2)) \end{aligned}$$

同様に

$$\Psi'_{(0,1)}(\vec{r}_1,\sigma_1;\vec{r}_2,\sigma_2) = \varphi_{(0,1)}(\vec{r}_1)\varphi_{(0,1)}(\vec{r}_2)\frac{1}{\sqrt{2}}(\chi_{\uparrow}(\sigma_1)\chi_{\downarrow}(\sigma_2) - \chi_{\downarrow}(\sigma_1)\chi_{\uparrow}(\sigma_2))$$

また

$$
\begin{aligned}
\Psi_{S=0}(\vec{r}_1,\sigma_1;\vec{r}_2,\sigma_2) =& \frac{1}{\sqrt{2}}\langle 0|\psi_{\sigma_1}(\vec{r}_1)\psi_{\sigma_2}(\vec{r}_2)\frac{1}{\sqrt{2}}\Big(c^\dagger_{(1,0)\uparrow}c^\dagger_{(0,1)\downarrow}|0\rangle - c^\dagger_{(1,0)\downarrow}c^\dagger_{(0,1)\uparrow}|0\rangle\Big) \\
=& \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)^2 \times \\
& \Big(\psi_{(0,1)}(\vec{r}_1)\chi_\downarrow(\sigma_1)\psi_{(1,0)}(\vec{r}_2)\chi_\uparrow(\sigma_2) - \psi_{(1,0)}(\vec{r}_1)\chi_\uparrow(\sigma_1)\psi_{(0,1)}(\vec{r}_2)\chi_\downarrow(\sigma_2) \\
& + \psi_{(0,1)}(\vec{r}_1)\chi_\uparrow(\sigma_1)\psi_{(1,0)}(\vec{r}_2)\chi_\downarrow(\sigma_2) - \psi_{(1,0)}(\vec{r}_1)\chi_\downarrow(\sigma_1)\psi_{(0,1)}(\vec{r}_2)\chi_\downarrow(\sigma_1)\Big) \\
=& \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)^2 \times \Big\{\psi_{(0,1)}(\vec{r}_1)\psi_{(1,0)}(\vec{r}_2)\Big(\chi_\downarrow(\sigma_1)\chi_\uparrow(\sigma_2) + \chi_\uparrow(\sigma_1)\chi_\downarrow(\sigma_2)\Big) \\
& - \psi_{(1,0)}(\vec{r}_1)\psi_{(0,1)}(\vec{r}_2)\Big(\chi_\uparrow(\sigma_1)\chi_\downarrow(\sigma_2) + \chi_\downarrow(\sigma_1)\chi_\uparrow(\sigma_2)\Big)\Big\} \\
=& \frac{1}{\sqrt{2}}\Big(\psi_{(0,1)}(\vec{r}_1)\psi_{(1,0)}(\vec{r}_2) - \psi_{(1,0)}(\vec{r}_1)\psi_{(0,1)}(\vec{r}_2)\Big) \\
& \times \frac{1}{\sqrt{2}}\Big(\chi_\uparrow(\sigma_1)\chi_\downarrow(\sigma_2) + \chi_\downarrow(\sigma_1)\chi_\uparrow(\sigma_2)\Big)
\end{aligned}
$$

$X_1(x) \propto xe^{-\frac{m\omega}{\hbar}x^2}$ に注意すると $x \to -x$ という操作に対して $\Psi_{S=0}$ は符号を変えるが $\Psi'_{(0,1)}, \Psi'_{(1,0)}$ は不変であり，相互作用も不変であるから $\Psi_{S=0}$ と $\Psi'_{(0,1)}, \Psi'_{(1,0)}$ との間に行列要素はなく，$\Psi_{S=0}$ のエネルギーは対角和の方法で

$$
E_{S=0} = 4J - 2K - 3(J-K) = J + K
$$

また $\Psi'_{(0,1)}, \Psi'_{(1,0)}$ の 2 状態間のハミルトニアン行列は

$$
\begin{pmatrix} J' & K \\ K & J' \end{pmatrix}
$$

だから固有値は

$$
J' \pm K
$$

となる．

まとめて

$$
\begin{aligned}
E_{S=1} =& J - K \\
E_{S=0} =& J + K \\
E(\Psi'_{(0,1)}, \Psi'_{(1,0)}) \to& J' \pm K
\end{aligned}
$$

さらに

$$J' \geq J$$

をみとめれば基底状態は $\Psi(S=1)$ であたえられ，$S=1$ で 3 重に縮退する．

この仮定は同等なことなる軌道のクーロン積分は同一軌道内でのクーロン積分より小さいという物理的には自然な事実ではあるが，数学的には次のようにして確認できる．

$$\begin{aligned}
2(J'-J) =& J((0,1);(0,1)) + J((1,0);(1,0)) - J((0,1);(1,0)) - J((1,0);(0,1)), \quad a=(0,1), b=(1,0) \\
=& \frac{e^2}{4\pi\epsilon}\int d^3r \int d^3r'\, \frac{1}{|\vec{r}-\vec{r}'|} \\
& \times \left(|\varphi_a(\vec{r})|^2 |\varphi_a(\vec{r}')|^2 + |\varphi_b(\vec{r})|^2 |\varphi_b(\vec{r}')|^2 - |\varphi_a(\vec{r})|^2 |\varphi_b(\vec{r}')|^2 - |\varphi_b(\vec{r})|^2 |\varphi_a(\vec{r}')|^2 \right) \\
=& \frac{e^2}{4\pi\epsilon}\int d^3r \int d^3r'\, \frac{1}{2\pi^2}\int d^3k \frac{1}{k^2} e^{i\vec{k}\cdot(\vec{r}-\vec{r}')} \big(|\varphi_a(\vec{r})|^2| - |\varphi_b(\vec{r})|^2|\big)\big(|\varphi_a(\vec{r}')|^2| - |\varphi_b(\vec{r}')|^2|\big), \\
=& \frac{1}{2\pi^2}\int d^3k \frac{1}{k^2} \left| \int d^3r\, e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \big(|\varphi_a(\vec{r})|^2| - |\varphi_b(\vec{r})|^2|\big) \right|^2 \geq 0
\end{aligned}$$

である．ここで

$$\frac{1}{r} = \frac{1}{2\pi^2}\int d^3k e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \frac{1}{k^2}$$