# 【量子力学演習の略解】

## [NO. 8]

5. (a) $[S_x, S_y] = [S_{1x}+S_{2x},\ S_{1y}+S_{2y}] = i\hbar S_{1z} + i\hbar S_{2z}$

$$= i\hbar S_z \quad /\!/$$

(b) $\boldsymbol{S}^2 = \boldsymbol{S}_1^2 + \boldsymbol{S}_2^2 + 2\boldsymbol{S}_1\cdot\boldsymbol{S}_2 = \frac{3}{2}\hbar^2 + 2\boldsymbol{S}_1\cdot\boldsymbol{S}_2$

(c) $\boldsymbol{S}_1\cdot\boldsymbol{S}_2 = S_{1x}S_{2x} + S_{1y}S_{2y} + S_{1z}S_{2z}$

ここで
$$\begin{cases} S_{1x}S_{2x}\,\chi^{(1)}_{\frac{1}{2}}\chi^{(2)}_{\frac{1}{2}} = \frac{1}{4}\hbar^2\,\chi^{(1)}_{-\frac{1}{2}}\chi^{(2)}_{-\frac{1}{2}} \\ S_{1y}S_{2y}\,\chi^{(1)}_{\frac{1}{2}}\chi^{(2)}_{\frac{1}{2}} = -\frac{1}{4}\hbar^2\,\chi^{(1)}_{-\frac{1}{2}}\chi^{(2)}_{-\frac{1}{2}} \end{cases}$$

また $S_{1z}S_{2z}\,\chi^{(1)}_{\frac{1}{2}}\chi^{(2)}_{\frac{1}{2}} = \frac{\hbar^2}{4}\,\chi^{(1)}_{\frac{1}{2}}\chi^{(2)}_{\frac{1}{2}}$

これより
$$\boldsymbol{S}_1\cdot\boldsymbol{S}_2\,\chi^{(1)}_{\frac{1}{2}}\chi^{(2)}_{\frac{1}{2}} = \frac{\hbar^2}{4}\,\chi^{(1)}_{\frac{1}{2}}\chi^{(2)}_{\frac{1}{2}} \qquad \text{となる}$$

よって
$$\boldsymbol{S}^2\,\chi^{(1)}_{\frac{1}{2}}\chi^{(2)}_{\frac{1}{2}} = \left(\frac{3}{2}\hbar^2 + \frac{2}{4}\hbar^2\right)\chi^{(1)}_{\frac{1}{2}}\chi^{(2)}_{\frac{1}{2}}$$
$$= 2\hbar^2\,\chi^{(1)}_{\frac{1}{2}}\chi^{(2)}_{\frac{1}{2}} = \hbar^2 S(S+1)\,\chi^{(1)}_{\frac{1}{2}}\chi^{(2)}_{\frac{1}{2}} \quad \text{より} \quad (S=1)$$

また $S_z\,\chi^{(1)}_{\frac{1}{2}}\chi^{(2)}_{\frac{1}{2}} = \hbar\,\chi^{(1)}_{\frac{1}{2}}\chi^{(2)}_{\frac{1}{2}}$

同様にして
$$\begin{cases} \boldsymbol{S}^2\,\chi^{(1)}_{-\frac{1}{2}}\chi^{(2)}_{-\frac{1}{2}} = 2\hbar^2\,\chi^{(1)}_{-\frac{1}{2}}\chi^{(2)}_{-\frac{1}{2}} \\ S_z\,\chi^{(1)}_{-\frac{1}{2}}\chi^{(2)}_{-\frac{1}{2}} = -\hbar\,\chi^{(1)}_{-\frac{1}{2}}\chi^{(2)}_{-\frac{1}{2}} \end{cases}$$

(d)

$$S_{1x}S_{2x}\chi^{(1)}_{\frac{1}{2}}\chi^{(2)}_{-\frac{1}{2}} = \frac{\hbar^2}{4}\chi^{(1)}_{-\frac{1}{2}}\chi^{(2)}_{\frac{1}{2}}$$

$$S_{1y}S_{2y}\chi^{(1)}_{\frac{1}{2}}\chi^{(2)}_{-\frac{1}{2}} = \frac{\hbar^2}{4}\chi^{(1)}_{-\frac{1}{2}}\chi^{(2)}_{\frac{1}{2}}$$

よって この2つが打消し合わないので

固有関数になっていない!

同様にして

$$\begin{cases} S_{1x}S_{2x}\chi^{(1)}_{-\frac{1}{2}}\chi^{(2)}_{\frac{1}{2}} = \frac{\hbar^2}{4}\chi^{(1)}_{\frac{1}{2}}\chi^{(2)}_{-\frac{1}{2}} \\ S_{1y}S_{2y}\chi^{(1)}_{-\frac{1}{2}}\chi^{(2)}_{\frac{1}{2}} = \frac{\hbar^2}{4}\chi^{(1)}_{\frac{1}{2}}\chi^{(2)}_{-\frac{1}{2}} \end{cases}$$

(e) (d)でみたように、$\chi^{(1)}_{\frac{1}{2}}\chi^{(2)}_{-\frac{1}{2}}$ と $\chi^{(1)}_{-\frac{1}{2}}\chi^{(2)}_{\frac{1}{2}}$ を

加えたり差し引いたりすると固有関数がもとまる.

これより

$$\begin{cases} S^2\,\Psi_{10} = 2\hbar^2\,\Psi_{10} & (S=1) \\ S_z\,\Psi_{10} = 0 & (S_z=0) \end{cases}$$

$$\begin{cases} S^2\,\Psi_{00} = 0 & (S=0) \\ S_z\,\Psi_{00} = 0 & (S_z=0) \end{cases}$$

が示せる

【No.9】

2. (a) $H' = \beta x$

1次の振動エネルギーは

$$E_1 = \langle 0|H'|0\rangle = \langle 0|\beta x|0\rangle = 0$$ (対称性より)

一方, (厳密解) $H_0 = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 + \beta x$

$$= \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\left(x + \frac{\beta}{m\omega^2}\right)^2 - \frac{\beta^2}{2m\omega^2}$$

$x' = x + \frac{\beta}{m\omega^2}$ とおきかえると

$$H_0' = \frac{p'^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x'^2 - \frac{\beta^2}{2m\omega^2}$$

これより $\beta$の1次の項はゼロ.

(b) $H' = \beta x^2$ のとき

$$E_1 = \langle 0|\beta x^2|0\rangle$$

一方 Virial 定理により $\langle 0|\frac{1}{2}m\omega^2 x^2|0\rangle = \frac{1}{2}\frac{\hbar\omega}{2}$

$$\therefore \langle 0|x^2|0\rangle = \frac{\hbar\omega}{2m\omega^2} = \frac{\hbar}{2m\omega}$$

$$\therefore \underline{E_1 = \frac{\hbar\beta}{2m\omega}}$$

一方 (厳密解) $H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\left(1 + \frac{2\beta}{m\omega^2}\right)x^2$

より $\omega'^2 = \omega^2\left(1 + \frac{2\beta}{m\omega^2}\right)$ とおくと

最低エネルギー状態のエネルギーは

$$E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega' = \frac{1}{2}\hbar\omega\left(1 + \frac{2\beta}{m\omega^2}\right)^{\frac{1}{2}} = \frac{1}{2}\hbar\omega\left(1 + \frac{\beta}{m\omega^2} + \cdots\right)$$

$$E_0^{(1)} = \frac{\hbar\beta}{2m\omega}$$ が一致している.

(c)

$$E_2 = -\sum_{n\neq 0} \frac{1}{E_n^{(0)} - E_0^{(0)}} \left|\langle 0|H'|n\rangle\right|^2$$

$$= -\sum_{n\neq 0} \frac{1}{(n+\frac{1}{2})\hbar\omega - \frac{1}{2}\hbar\omega} \left|\langle 0|\beta x|n\rangle\right|^2$$

一方, $x = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}}\,(a+a^{+})$ よって $\langle 0|a|1\rangle = 1$ より

$$E_2 = -\frac{1}{\hbar\omega}\,\beta^2\cdot\left(\frac{1}{2}\sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}}\right)^2 = -\frac{\beta^2}{2m\omega^2}$$

（厳密解の答と一致している）

5. (a)

$$H = \frac{1}{2m}\left(\mathbb{p} - \frac{e}{c}\mathbb{A}\right)^2 - \frac{e^2}{r}$$

$$= \frac{1}{2m}\left(\mathbb{p}^2 - \frac{e}{c}\mathbb{p}\cdot\mathbb{A} - \frac{e}{c}\mathbb{A}\cdot\mathbb{p} + \frac{e^2}{c^2}\mathbb{A}^2\right) - \frac{e^2}{r}$$

一方 $\mathbb{p}\cdot\mathbb{A} = -i\hbar\nabla\cdot\mathbb{A} = -i\hbar\left(\nabla\cdot\mathbb{A} + \mathbb{A}\cdot\nabla\right)$

ところが $\nabla\cdot\mathbb{A} = \nabla\cdot\frac{1}{2}\mathbb{B}\times\mathbb{r} = -\frac{1}{2}(\nabla\times\mathbb{r})\cdot\mathbb{B} = 0$

よって

$$H = \frac{\mathbb{p}^2}{2m} - \frac{e^2}{r} - \frac{e}{mc}\mathbb{A}\cdot\mathbb{p} + \frac{e^2}{2mc^2}\mathbb{A}^2$$

$$H' = -\frac{e}{mc}\mathbb{A}\cdot\mathbb{p} + \frac{e^2}{2mc^2}\mathbb{A}^2$$

（2の は無視する）

$\mathbb{A} = \frac{1}{2}\mathbb{B}\times\mathbb{r}$ を代入.

$$\therefore\ \underline{H' = -\frac{e}{2mc}\mathbb{B}\cdot\mathbb{L}}$$

（$\mathbb{L}$ は角運動量）

(b)
$$H' = -\frac{eB}{2mc} L_z$$

$$E_{1s}^{(1)} = \langle \psi_{1s} | -\frac{eB}{2mc} L_z | \psi_{1s} \rangle = 0$$

(c) 2p 状態の波動関数は

$$\psi_{2p}^{(m)}(r) = R_{2p}(r) Y_{1m}(\theta\varphi) \quad (m=0,\pm1)$$

より

$$E_{2p}^{(1)} = \langle \psi_{2p}^{(m)} | H' | \psi_{2p}^{(m)} \rangle$$

$$= -\frac{eB}{2mc} m \quad // \quad (m=0,\pm1)$$

【NO.10】

1. (a)
$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$$

$$\psi = N e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 x^2}$$ とすると

$$\langle \psi | H | \psi \rangle = N^2 \left[ \frac{\hbar^2}{2m}\left(\alpha\sqrt{\pi} - \frac{\alpha}{2}\sqrt{\pi}\right) + \frac{1}{4}m\omega^2\sqrt{\frac{\pi}{\alpha^6}} \right]$$

$$\langle \psi | \psi \rangle = N^2 \sqrt{\frac{\pi}{\alpha^2}}$$

(b)
$$E = \frac{\langle \psi | H | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} = \frac{\hbar^2}{4m}\alpha^2 + \frac{1}{4}m\omega^2\frac{1}{\alpha^2}$$

$\frac{\partial E}{\partial \alpha} = 0$ より $E$ の最小値は

$$\underline{E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega}$$

2. (a)

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{2}m\omega^2 r^2$$

$$\psi(r) = N e^{-\alpha r}$$

より

$$\langle\psi|H|\psi\rangle = N^2\int_0^\infty \left(\frac{\hbar^2\alpha}{2m}\frac{2}{r} - \frac{\hbar^2}{2m}\alpha^2 + \frac{1}{2}m\omega^2 r^2\right) \times$$

$$e^{-2\alpha r} r^2 dr\, 4\pi .$$

$$\therefore \langle\psi|H|\psi\rangle = 4\pi N^2\left[\frac{\hbar^2}{m\alpha}\left(\frac{1}{4}-\frac{1}{8}\right) + \frac{3}{8}\frac{m\omega^2}{\alpha^5}\right]$$

$$\langle\psi|\psi\rangle = N^2\int_0^\infty e^{-2\alpha r} r^2 dr\, 4\pi = 4\pi N^2\frac{1}{4\alpha^3}$$

より

$$E = \frac{\langle\psi|H|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle} = \frac{\hbar^2}{2m}\alpha^2 + \frac{3}{2}\frac{m\omega^2}{\alpha^2}$$

$$\frac{\partial E}{\partial \alpha} = 0 \quad \text{より} \quad \underline{E_0 = \sqrt{3}\,\hbar\omega}$$

(b)

$$\psi = N e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 r^2}$$

$$\langle\psi|H|\psi\rangle = 4\pi N^2\left[\frac{\hbar^2\alpha^2}{2m}\left(\frac{3}{4}\sqrt{\frac{\pi}{\alpha^6}} - \frac{3\alpha^2}{8}\sqrt{\frac{\pi}{\alpha^{10}}}\right) + \frac{1}{2}m\omega^2\frac{3}{8}\sqrt{\frac{\pi}{\alpha^{10}}}\right]$$

$$\langle\psi|\psi\rangle = 4\pi N^2\cdot\frac{1}{4}\sqrt{\frac{\pi}{\alpha^6}}$$

より

$$E = \frac{\hbar^2\alpha^2}{2m}\left(3 - \frac{3\alpha^2}{2\alpha^2}\right) + \frac{1}{2}m\omega^2\frac{3}{2\alpha^2} = \frac{3\hbar^2\alpha^2}{4m} + \frac{3m\omega^2}{4\alpha^2}$$

$$\frac{\partial E}{\partial \alpha} = 0 \quad \text{より} \quad \underline{E_0 = \frac{3}{2}\hbar\omega}$$

正しい答と一致している.

3. (a) $\psi(r) = N e^{-\alpha r}$ のとき

$$\langle \psi | -\frac{Ze^2}{r} | \psi \rangle = -Ze^2 N^2 (4\pi) \cdot \frac{1}{(2\alpha)^2}$$

よって

$$E = \frac{\hbar^2}{2m}\alpha^2 - Ze^2\alpha = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\alpha - \frac{m}{\hbar^2}(Ze^2)\right)^2 - \frac{m(Ze^2)^2}{2\hbar^2}$$

よって 最小値は $\underline{E_0 = -\frac{m(Ze^2)^2}{2\hbar^2}}$

(b) $\psi = N e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 r^2}$ としたとき 同様に計算すると

$$E = \frac{3\hbar^2\alpha^2}{4m} - \frac{2Ze^2}{\sqrt{\pi}}\alpha = \frac{3\hbar^2}{4m}\left(\alpha - \frac{4mZe^2}{3\hbar^2\sqrt{\pi}}\right)^2 - \frac{4m(Ze^2)^2}{3\pi\hbar^2}$$

よって $E_0 = -\underbrace{\frac{4}{3\pi}}_{0.42}\frac{m(Ze^2)^2}{\hbar^2}$

正しい答よりも上にある。

4. (a) スピンの自由度があるので ↑と↓に入っている

(b) $H = H_1 + H_2$ のとき

1つの電子 $E_0 = -\frac{m(Ze^2)^2}{2n^2\hbar^2}$

$Z=2,\ n=1$ なので $\underline{E_0 = -\frac{4me^4}{2\hbar^2}}$

(c) $E^{(1)} = \langle \Psi_0 | H_{12} | \Psi_0 \rangle$

$$= \int \phi_{1s}^*(r_1)\,\phi_{1s}^*(r_2)\,\frac{e^2}{|r_1 - r_2|}\,\phi_{1s}(r_1)\,\phi_{1s}(r_2)\,d^3r_1\,d^3r_2$$

ここで $\phi(r) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} 2e^{-\frac{Z}{a_0}r}$

$$\therefore\ E^{(1)} = \left[\frac{1}{\sqrt{4\pi}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} 2\right]^4 e^2 \int e^{-\frac{2Z}{a_0}(r_1+r_2)} \frac{d^3r_1\, d^3r_2}{|\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2|}$$

角度積分を先にやる

$$I \equiv \int \frac{\sin\theta_1 d\theta_1 d\varphi_1 \sin\theta_2 d\theta_2 d\varphi_2}{|\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2|}$$

$$= (2\pi)^2 \cdot 2\int_{-1}^{1} \frac{dt}{\sqrt{r_1^2+r_2^2-2r_1r_2 t}}, \quad t = \cos\theta_1$$

$$= \frac{2(2\pi)^2}{r_1r_2}\left(r_1+r_2-|r_1-r_2|\right)$$

より

$$E^{(1)} = \frac{1}{(4\pi)^2}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^6 2^4 \cdot e^2 \cdot 2(2\pi)^2 \times$$

$$\int_0^\infty r_1 dr_1 \int_0^\infty r_2 dr_2 \left(r_1+r_2-|r_1-r_2|\right) e^{-2\alpha(r_1+r_2)}$$

（但し $\alpha \equiv \frac{Z}{a_0}$ とおく）

$$II \equiv \int_0^\infty r_1 dr_1 \int_0^\infty r_2 dr_2 \left(r_1+r_2-|r_1-r_2|\right) e^{-2\alpha(r_1+r_2)}$$

$$= \int_0^\infty e^{-2\alpha r_1} r_1 dr_1 \left[\int_0^{r_1} r_2 dr_2 e^{-2\alpha r_2} 2r_2 + \int_{r_1}^\infty r_2 dr_2 e^{-2\alpha r_2} 2r_1\right]$$

$$= 2\cdot\frac{1}{(2\alpha)^5}\cdot\left[2-\frac{2}{4}-\frac{2}{2^3}\right] = \frac{5}{2^6}\frac{1}{\alpha^5} \quad //$$

これより

$$E^{(1)} = \frac{5}{8}\alpha e^2 = \frac{5}{8}\frac{Ze^2}{a_0} \quad //$$

摂動論による He のエネルギーは

$$E_0 = -\frac{me^4}{\hbar^2}\left(4-\frac{5}{4}\right) = -2.75\left(\frac{me^4}{\hbar^2}\right) \quad //$$

(d) $\phi(r) = N e^{-\alpha r}$ とすると

$$E = \langle \phi(r_1)\phi(r_2) | H | \phi(r_1)\phi(r_2) \rangle$$

$$= \left(\frac{\hbar^2}{2m}\alpha^2 - Ze^2\alpha\right) \times 2 + \frac{5}{8}\alpha e^2$$

$$= \frac{\hbar^2}{m}\left(\alpha - \frac{27}{16}\frac{me^2}{\hbar^2}\right)^2 - \frac{me^4}{\hbar^2}\cdot\underline{\underline{\left(\frac{27}{16}\right)^2}}$$

2.848

よって

$$E_0 = -2.848\left(\frac{me^4}{\hbar^2}\right)$$

摂動論よりも低いエネルギーが求まった。

【No. 11】

1. (a) $\delta(x) = \frac{1}{2\pi\hbar}\int e^{\frac{i}{\hbar}px}\,dp$

$$\tilde{\phi}(p) = \int e^{\frac{i}{\hbar}px}\,\phi(x)\,dx$$

ここで

$$\int \tilde{\phi}(p')\, e^{-\frac{i}{\hbar}p'x}\,\frac{dp'}{2\pi\hbar} = \int e^{\frac{i}{\hbar}(x'-x)p'}\,\frac{dp'}{2\pi\hbar}\,\phi(x')\,dx'$$

$$= \int \delta(x'-x)\,\phi(x')\,dx' = \phi(x) \quad //$$

(b) 略

(c) $$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2\right]\int\tilde{\phi}(p)\,e^{-\frac{i}{\hbar}px}\frac{dp}{2\pi\hbar}=E\int\hat{\phi}(p)\,e^{-\frac{i}{\hbar}px}\frac{dp}{2\pi\hbar}$$

部分積分を2回すると

$$\int\left[\frac{p^2}{2m}-\frac{1}{2}m\omega^2\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial p^2}\right]\hat{\phi}(p)\,e^{-\frac{i}{\hbar}px}\frac{dp}{2\pi\hbar}=\int E\tilde{\phi}(p)\,e^{-\frac{i}{\hbar}px}\frac{dp}{2\pi\hbar}$$

この式が任意の $e^{-\frac{i}{\hbar}px}$ に対して成立する

$$\Downarrow$$

$$\therefore\ \left(\frac{p^2}{2m}-\frac{1}{2}m\omega^2\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial p^2}\right)\tilde{\phi}(p)=E\hat{\phi}(p)$$

(d) この式が

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2M}\frac{\partial^2}{\partial p^2}+\frac{1}{2}M\Omega^2p^2\right)\tilde{\phi}(p)=E\hat{\phi}(p)$$

が等しくなるためには

$\Omega=\omega,\ M=\dfrac{1}{m\omega^2}$ であればよい。

よってこの時

$$E=\frac{1}{2}\hbar\Omega=\frac{1}{2}\hbar\omega$$ 最低エネルギーの値

このとき $$\hat{\phi}(p)=\left(\frac{\hat{\alpha}^2}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}}e^{-\frac{1}{2}\hat{\alpha}^2p^2}$$

$$\hat{\alpha}=\sqrt{\frac{M\Omega}{\hbar}}=\sqrt{\frac{1}{\hbar m\omega}}$$

(e) $$\phi(x)=\left(\frac{\alpha^2}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}}e^{-\frac{1}{2}\alpha^2x^2}\qquad\alpha=\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$$

$$\hat{\phi}(p)=\int e^{\frac{i}{\hbar}px}\left(\frac{\alpha^2}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}}e^{-\frac{1}{2}\alpha^2x^2}\,dx$$

よって $\tilde{\phi}(p) = \left(\frac{4\pi}{\alpha^2}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{p^2}{2\alpha^2\hbar^2}}$

これは (d) で求めたものと一致する.

2. (a) $a|\phi_0\rangle = 0$

$$\left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\,x + \frac{\hbar}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\frac{\partial}{\partial x}\right)\langle x|\phi_0\rangle = 0$$

$$\therefore \left(\frac{\partial}{\partial x} + \frac{m\omega}{\hbar}x\right)\phi_0(x) = 0$$

$$\underline{\phi_0(x) = N e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)x^2}}$$

$\alpha^2 = \frac{m\omega}{\hbar}$ として $\phi_0 = \left(\frac{\alpha^2}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 x^2}$ //

(b)

$$\phi_1(x) = \left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\,x - \frac{\hbar}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\frac{\partial}{\partial x}\right)\phi_0(x)$$

$$= N_1\,\alpha x\,e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 x^2}$$

3. (a) ルートの中のオペレータは定義されていない.

(b) $\psi$ の成分は1つなのでスピンは0

(c) 略

(d) 正負のエネルギーの自由度に対応している.

4. (a) 3重項

(b) スピンで反対称なものは

$$\Phi_{00} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\chi_1^\uparrow\chi_2^\downarrow - \chi_1^\downarrow\chi_2^\uparrow\right)$$

5. (a) $x<0$ $E=\frac{\hbar^2k^2}{2m}$

(b) (i) $E>U_0$ のとき $\kappa^2=\frac{2m}{\hbar^2}(E-U_0)$ とおく

$$\underline{u=C_1e^{i\kappa x}+C_2e^{-i\kappa x}}$$

(ii) $E<U_0$ のとき

$K^2=\frac{2m}{\hbar^2}(U_0-E)$ とおく

$$\underline{u=C_1'e^{-Kx}+C_2'e^{Kx}}$$

(c) $x>a$

$$\underline{u=Be^{ikx}}$$ 透過波のみ

接続条件できめる.

(i) $E>U_0$ のとき

$x=0$ の接続:
$$\begin{cases}1+A=C_1+C_2\\ ik-ikA=i\kappa(C_1-C_2)\end{cases}$$

$x=a$ の接続:
$$\begin{cases}C_1e^{i\kappa a}+C_2e^{-i\kappa a}=Be^{ika}\\ i\kappa(C_1e^{i\kappa a}-C_2e^{-i\kappa a})=ikBe^{ika}\end{cases}$$

よって

$$\underline{A=\frac{\left(1-\frac{k^2}{\kappa^2}\right)e^{-2i\kappa a}-\left(1-\frac{k^2}{\kappa^2}\right)}{\left(1-\frac{k}{\kappa}\right)^2-\left(1+\frac{k}{\kappa}\right)^2e^{-2i\kappa a}}}$$

$$\underline{B=\frac{\frac{1}{2}e^{-ika-i\kappa a}}{1-\frac{k}{\kappa}}\left[1-\frac{k}{\kappa}+A\left(1+\frac{k}{\kappa}\right)\right]}$$

(ii) $E<U_0$ のとき $\kappa\to iK$ とすればよい

【NO. 12】

1. (a) $u = A e^{\frac{i}{\hbar}(S_0 + \hbar S_1)}$

とおいて Schrödinger 方程式に代入

[$\hbar$ の0次] $\left(\frac{dS_0}{dx}\right)^2 = 2m(E-V)$

[$\hbar$ の1次] $i\frac{d^2S_0}{dx^2} = 2\frac{dS_0}{dx}\cdot\frac{dS_1}{dx}$

(b)

(i) $E > V$ $p(x) = \sqrt{2m(E-V)}$ とおいて

$$\begin{cases} S_0 = \int^x p(x')dx' \\ S_1 = \frac{i}{2}\ln p \end{cases}$$

(ii) $E < V$ 同様にして $q(x) = \sqrt{2m(V-E)}$

$$\begin{cases} S_0 = i\int^x q(x')dx' \\ S_1 = \frac{i}{2}\ln q \end{cases}$$

(c) $\frac{1}{2m}\left(\frac{dS_0}{dx}\right)^2 + V = E$

Hamilton-Jacobi の式は

$\frac{p^2}{2m} + V = E$ で $p = \frac{\partial S}{\partial x}$ とおいたものと

一致している。

2. $\begin{cases} u(x) = e^{ikx} & x<0 \\ u(x) = B\, e^{ikx} & x>a \end{cases}$

$0<x<a$ の範囲では

$$u = C\, e^{-\frac{1}{\hbar}\int_b^x q(x')dx'} \quad , \quad q(x) = \sqrt{2m(U_0-E)}$$

$x=0$ の接続： $1 = C\, e^{-\frac{1}{\hbar}\int_b^0 q(x')dx'}$

$x=a$ の接続： $C\, e^{-\frac{1}{\hbar}\int_b^a q(x')dx'} = B\, e^{ika}$

これより $B = e^{-ika}\, e^{-\frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(U_0-E)}\, a}$

$$\underline{|B|^2 = e^{-\frac{2}{\hbar}\sqrt{2m(U_0-E)}\, a}}$$

一方、厳密解は

$$\underline{B = \frac{\frac{1}{2}e^{-Ka-ika}}{\frac{K}{k}-i}\left(\frac{K}{k}-i+A\left(\frac{K}{k}+i\right)\right)}$$

但し $\underline{A = \frac{\left(\frac{K^2}{k^2}+1\right)\left(1-e^{-2Ka}\right)}{\left(\frac{K}{k}+i\right)^2 e^{-2Ka}-\left(\frac{K}{k}-i\right)^2}}$

ここで $e^{-2Ka} \approx 0$ , $\frac{K}{k} \ll 1$ とすると $A \simeq 1$

よって

$$\underline{|B|^2 \simeq e^{-2Ka} = e^{-\frac{2}{\hbar}\sqrt{2m(U_0-E)}\, a}}$$

で一致している。

3. (a) $u(x) = A e^{ikx}$

$u(x) = u(x+L)$ より

$e^{ikL} = 1 \quad \therefore \quad \underline{k = \frac{2\pi}{L} n} \quad (n = 0, \pm 1, \cdots)$

(b) $\langle u_n | \hat{p} x - x \hat{p} | u_m \rangle = -i\hbar \delta_{mn}$

$\hat{p} u_m = \frac{2\pi\hbar}{L} m \, u_m$ より

$\langle u_n | \frac{2\pi\hbar}{L} n x - x \frac{2\pi\hbar}{L} m | u_m \rangle = -i\hbar \delta_{mn}$

$\therefore \underline{\frac{2\pi\hbar}{L} (n-m) \langle u_n | x | u_m \rangle = -i\hbar \delta_{mn}}$

(c) $n = m$ のとき 左辺 $= 0$ 右辺 $= -i\hbar$ で矛盾する.

周期的境界条件をつけると

$\langle u_n | \hat{p} x | u_m \rangle = \int u_n^* \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} x\right) u_m \, dx$

$= -i\hbar \left(u_n^* u_m x\right)_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} + i\hbar \int \left(\frac{du_n^*}{dx}\right) x \, u_m \, dx$

$= -i\hbar \frac{1}{L} \left[ e^{-i\pi(n-m)} \frac{L}{2} + e^{i\pi(n-m)} \frac{L}{2} \right] + \int (\hat{p} u_n)^* x \, u_m \, dx$

となるが $n = m$ のとき 第1項は

$-i\hbar \frac{1}{L} L = -i\hbar$ となり境界でゼロにならない!!