期末試験 1　次の問に答えなさい．

(1) 3 次元中心力場での波動関数 $\varphi(\boldsymbol{r}) = R(r)Y_l^{m_l}(\theta,\phi)$ を表すとき，$Y_l^{m_l}(\theta,\phi)$ の名称を答えなさい．

(2) 軌道角運動量 $\hat{\boldsymbol{L}}$ について，$\hat{\boldsymbol{L}}^2$ の固有値を書きなさい．ただし，方位量子数を l，ディラック定数を $\hbar$ としなさい．

(3) 3 次元クーロン場において，系のエネルギー固有値を定める自然数 n の名称を答えなさい．

(4) 正常ゼーマン効果について，「磁場」,「縮退」というキーワードを用いて説明しなさい．

期末試験 2　$\hat{r} = r$，$\hat{p}_r = \dfrac{\hbar}{i}\dfrac{1}{r}\dfrac{\partial}{\partial r}r$ について，これらが正準交換関係 $[\hat{r},\hat{p}_r] = i\hbar$ を満たすことを示しなさい．

期末試験 3　3 次元中心力場で現れる微分方程式 $\dfrac{1}{\sin\theta}\dfrac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\dfrac{\partial Y(\theta,\phi)}{\partial\theta}\right)+\dfrac{1}{\sin^2\theta}\dfrac{\partial^2 Y(\theta,\phi)}{\partial\phi^2}+\lambda Y(\theta,\phi)=0$（ただし，$\lambda$ は定数）について，$Y(\theta,\phi)=\Theta(\theta)\Phi(\phi)$ と変数分離解を仮定する．このとき，次の問に答えなさい．

(1) $\dfrac{d^2\Phi(\phi)}{d\phi^2}+\nu\Phi(\phi)=0$（ただし，$\nu$ は定数）を満たすことを示しなさい．

(2) $\Phi(\phi)=\dfrac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{i\sqrt{\nu}\phi}$ という特解を考える．このとき，前問の定数 ν は $\nu=m_l^2$（ただし，m_l は整数）に限られることを説明しなさい．

(3) $\hat{L}_z=-i\hbar\dfrac{\partial}{\partial\phi}$ を踏まえて，$\hat{L}_z Y_l^{m_l}(\theta,\phi)=m_l\hbar Y_l^{m_l}(\theta,\phi)$ を説明しなさい．

期末試験 4　軌道角運動量の各成分 $\hat{L}_x = \frac{\hbar}{i}\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right)$，$\hat{L}_y = \frac{\hbar}{i}\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right)$, $\hat{L}_z = \frac{\hbar}{i}\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right)$ について，$\left[\hat{L}_x, \hat{L}_y\right] = i\hbar\hat{L}_z$，$\left[\hat{L}_y, \hat{L}_z\right] = i\hbar\hat{L}_x$，$\left[\hat{L}_z, \hat{L}_x\right] = i\hbar\hat{L}_y$ を満たす．

(1) パウリ行列 $\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$，$\hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$，$\hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$ について，$[\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y]$，$[\hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z]$，$[\hat{\sigma}_z, \hat{\sigma}_x]$ を求めなさい．

(2) スピンを表す演算子 $\hat{\boldsymbol{s}} = (\hat{s}_x, \hat{s}_y, \hat{s}_z)$ は，$\hat{\boldsymbol{\sigma}} = \left(\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z\right)$ を用いて $\hat{\boldsymbol{s}} = c\hat{\boldsymbol{\sigma}}$（ここで，$c$ は定数）と表される．スピンと軌道角運動量が同一の交換関係を有することを踏まえ，c を求めなさい．

期末試験 5　3 次元クーロン場での波動関数の動径成分 $R(r)$ は，エネルギー固有値 E（ただし，$E < 0$），$\rho = \dfrac{\sqrt{-8mE}}{\hbar}r$，$\lambda = \dfrac{e^2}{4\pi\varepsilon_0\hbar}\sqrt{\dfrac{m}{-2E}}$ を用いて，$\dfrac{d^2R}{d\rho^2} + \dfrac{2}{\rho}\dfrac{dR}{d\rho} - \left[\dfrac{l(l+1)}{\rho^2} - \dfrac{\lambda}{\rho} + \dfrac{1}{4}\right]R = 0$ を満たす．さらに，$\rho \to 0$ や $\rho \to \infty$ での値を踏まえて $R(\rho) = L(\rho)\rho^l e^{-\frac{\rho}{2}}$ を仮定すると，$L(\rho)$ は以下の微分方程式を満たす：

$$\rho\frac{d^2L}{d\rho^2} + (2l + 2 - \rho)\frac{dL}{d\rho} + (\lambda - 1 - l)L = 0$$

(1)　$L(\rho) = \displaystyle\sum_{n=0}^{\infty} a_n\rho^n$ を仮定するとき，$\dfrac{a_{n+1}}{a_n} = \dfrac{n + l + 1 - \lambda}{(n+1)(n+2l+2)}$ を示しなさい．

(2)　波動関数の有限性を考慮すると，$L(\rho)$ は有限次数の多項式となる．最高次数を n_m とするとき，λ を l と n_m を用いて表しなさい．

(3)　$n_p = n_m + l + 1$ を主量子数として，離散エネルギー固有値 E を求めなさい．

解答例

2023 年度 量子力学 II (鳴海担当分)　　　　番号:　　　　名前:

期末試験 1　次の問に答えなさい．

(1) 3 次元中心力場での波動関数 $\varphi(\boldsymbol{r}) = R(r)Y_l^{m_l}(\theta,\phi)$ を表すとき，$Y_l^{m_l}(\theta,\phi)$ の名称を答えなさい．

(2) 軌道角運動量 $\hat{\boldsymbol{L}}$ について，$\hat{\boldsymbol{L}}^2$ の固有値を書きなさい．ただし，方位量子数を l，ディラック定数を $\hbar$ としなさい．

(3) 3 次元クーロン場において，系のエネルギー固有値を定める自然数 n の名称を答えなさい．

(4) 正常ゼーマン効果について，「磁場」，「縮退」というキーワードを用いて説明しなさい．

(1) 球面調和関数

(2) $\hbar^2 l(l+1)$

(3) 主量子数

(4) 縮退したエネルギーが磁場をかけることで縮退が解けて $\mu_B B$ の等間隔に並んだエネルギー準位があらわれる現象のこと

期末試験 2　$\hat{r} = r$，$\hat{p}_r = \dfrac{\hbar}{i}\dfrac{1}{r}\dfrac{\partial}{\partial r}r$ について，これらが正準交換関係 $[\hat{r},\hat{p}_r] = i\hbar$ を満たすことを示しなさい．

f を適当な関数として，

$$[\hat{r},\hat{p}_r]f = (\hat{r}\hat{p}_r - \hat{p}_r\hat{r})f$$

$$= \left\{r\left(\frac{\hbar}{i}\cdot\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}r\right) - \left(\frac{\hbar}{i}\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}r\right)r\right\}f$$

$$= \frac{\hbar}{i}\left(\frac{\partial}{\partial r}r - \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}r^2\right)f$$

$$= -\frac{\hbar}{i}f = i\hbar f$$

$\therefore [\hat{r},\hat{p}_r] = i\hbar$ //

期末試験 3　3 次元中心力場で現れる微分方程式 $\dfrac{1}{\sin\theta}\dfrac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\dfrac{\partial Y(\theta,\phi)}{\partial\theta}\right)+\dfrac{1}{\sin^2\theta}\dfrac{\partial^2 Y(\theta,\phi)}{\partial\phi^2}+\lambda Y(\theta,\phi)=0$（ただし，$\lambda$ は定数）について，$Y(\theta,\phi)=\Theta(\theta)\Phi(\phi)$ と変数分離解を仮定する．このとき，次の問に答えなさい．

(1) $\dfrac{d^2\Phi(\phi)}{d\phi^2}+\nu\Phi(\phi)=0$（ただし，$\nu$ は定数）を満たすことを示しなさい．

(2) $\Phi(\phi)=\dfrac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{i\sqrt{\nu}\phi}$ という特解を考える．このとき，前問の定数 ν は $\nu=m_l^2$（ただし，m_l は整数）に限られることを説明しなさい．

(3) $\hat{L}_z=-i\hbar\dfrac{\partial}{\partial\phi}$ を踏まえて，$\hat{L}_z Y_l^{m_l}(\theta,\phi)=m_l\hbar Y_l^{m_l}(\theta,\phi)$ を説明しなさい．

(1) $Y=\Theta\Phi$ を微分方程式に代入すると，

$$\Phi\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\Theta}{\partial\theta}\right)+\Theta\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2\Phi}{\partial\phi^2}+\lambda\Theta\Phi=0$$

両辺を $\Theta\Phi$ でわって整理すると，

$$\frac{1}{\Theta}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\Theta}{\partial\theta}\right)+\lambda\sin^2\theta=-\frac{1}{\Phi}\frac{\partial^2\Phi}{\partial\phi^2}$$

よって両辺ともに定数と等しい．定数を ν とおくと 右辺から

$$-\frac{1}{\Phi}\frac{\partial^2\Phi}{\partial\phi^2}=\nu \qquad \therefore\ \frac{\partial^2\Phi}{\partial\phi^2}+\nu\Phi=0$$

(2) ϕ の周期性から $\Phi(2\pi)=\Phi(0)$

よって，$\dfrac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{i\sqrt{\nu}\cdot 2\pi}=\dfrac{1}{\sqrt{2\pi}}$ $\quad\therefore\ e^{i\sqrt{\nu}\cdot 2\pi}=1$

これは $\sqrt{\nu}$ が整数のとき，つまり m_l を整数として $\nu=m_l^2$ と表される．

(3) $\hat{L}_z Y(\theta,\phi)=\hat{L}_z\Theta\Phi=\Theta\cdot\left(-i\hbar\dfrac{\partial}{\partial\phi}\Phi\right)$

$$=\Theta\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial\phi}\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{i\sqrt{\nu}\phi}\right) \quad \because\ (2)\text{の特解を代入}$$

$$=-i\hbar\Theta\cdot\frac{i\sqrt{\nu}}{\sqrt{2\pi}}e^{i\sqrt{\nu}\phi}=\hbar\sqrt{\nu}\,Y(\theta,\phi)$$

(2)より $\hat{L}_z Y=\hbar m_l Y$，

期末試験 4　軌道角運動量の各成分 $\hat{L}_x = \frac{\hbar}{i}\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right)$，$\hat{L}_y = \frac{\hbar}{i}\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right)$, $\hat{L}_z = \frac{\hbar}{i}\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right)$ について，$\left[\hat{L}_x, \hat{L}_y\right] = i\hbar\hat{L}_z$，$\left[\hat{L}_y, \hat{L}_z\right] = i\hbar\hat{L}_x$，$\left[\hat{L}_z, \hat{L}_x\right] = i\hbar\hat{L}_y$ を満たす．

(1) パウリ行列 $\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$，$\hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$，$\hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$ について，$[\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y]$，$[\hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z]$，$[\hat{\sigma}_z, \hat{\sigma}_x]$ を求めなさい．

(2) スピンを表す演算子 $\hat{\boldsymbol{s}} = (\hat{s}_x, \hat{s}_y, \hat{s}_z)$ は，$\hat{\boldsymbol{\sigma}} = (\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z)$ を用いて $\hat{\boldsymbol{s}} = c\hat{\boldsymbol{\sigma}}$（ここで，$c$ は定数）と表される．スピンと軌道角運動量が同一の交換関係を有することを踏まえ，c を求めなさい．

(1) $$[\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y] = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} i & 0 \\ 0 & -i \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} -i & 0 \\ 0 & i \end{pmatrix} = 2i\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = 2i\hat{\sigma}_z$$

$$[\hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z] = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & i \\ i & 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & -i \\ -i & 0 \end{pmatrix} = 2i\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = 2i\hat{\sigma}_x$$

$$[\hat{\sigma}_z, \hat{\sigma}_x] = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = 2i\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} = 2i\hat{\sigma}_y$$

(2) $\hat{s} = c\hat{\sigma}$ について，

$$[\hat{s}_x, \hat{s}_y] = c^2[\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y] = 2ic^2\hat{\sigma}_z = 2ic\hat{s}_z$$

同様に $[\hat{s}_y, \hat{s}_z] = 2ic\hat{s}_x$，$[s_z, s_x] = 2ic\hat{s}_y$

これが $\hat{L}$ と同一の交換関係をもつことから $2ic = i\hbar$

$\therefore c = \frac{\hbar}{2}$

期末試験 5　3 次元クーロン場での波動関数の動径成分 $R(r)$ は，エネルギー固有値 E（ただし，$E < 0$），$\rho = \frac{\sqrt{-8mE}}{\hbar} r$，$\lambda = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0\hbar}\sqrt{\frac{m}{-2E}}$ を用いて，$\frac{d^2R}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho}\frac{dR}{d\rho} - \left[\frac{l(l+1)}{\rho^2} - \frac{\lambda}{\rho} + \frac{1}{4}\right]R = 0$ を満たす．さらに，$\rho \to 0$ や $\rho \to \infty$ での値を踏まえて $R(\rho) = L(\rho)\rho^l e^{-\frac{\rho}{2}}$ を仮定すると，$L(\rho)$ は以下の微分方程式を満たす：

$$\rho\frac{d^2L}{d\rho^2} + (2l+2-\rho)\frac{dL}{d\rho} + (\lambda - 1 - l)L = 0$$

(1)　$L(\rho) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n\rho^n$ を仮定するとき，$\frac{a_{n+1}}{a_n} = \frac{n+l+1-\lambda}{(n+1)(n+2l+2)}$ を示しなさい．

(2)　波動関数の有限性を考慮すると，$L(\rho)$ は有限次数の多項式となる．最高次数を n_m とするとき，λ を l と n_m を用いて表しなさい．

(3)　$n_p = n_m + l + 1$ を主量子数として，離散エネルギー固有値 E を求めなさい．

(1)　$\frac{dL}{d\rho} = \sum_{n=0}^{\infty} a_n n \rho^{n-1} = \sum_{n=0}^{\infty} a_{n+1}(n+1)\rho^n$, $\frac{d^2L}{d\rho^2} = \sum_{n=0}^{\infty} a_{n+1}(n+1)n\rho^{n-1}$ より

$$(与式) \Rightarrow \sum_{n=0}^{\infty} a_{n+1}(n+1)n\rho^n + \sum_{n=0}^{\infty} 2(l+1)(n+1)a_{n+1}\rho^n - \sum_{n=0}^{\infty} a_n n\rho^n + \sum_{n=0}^{\infty}(\lambda-1-l)a_n\rho^n = 0$$

$$\Leftrightarrow \sum_{n=0}^{\infty}\left[(n+1)(2l+2+n)a_{n+1} + (\lambda-1-l-n)a_n\right]\rho^n = 0$$

$$\therefore\ (n+1)(2l+2+n)a_{n+1} = (n+l+1-\lambda)a_n$$

$$\therefore\ \frac{a_{n+1}}{a_n} = \frac{n+l+1-\lambda}{(n+1)(2l+2+n)}$$

(2)　(1) に $n = n_m$ を代入すると，最高次という条件から $a_{n_m+1} = 0$

よって　$n_m + l + 1 - \lambda = 0$　　$\therefore\ \lambda = n_m + l + 1$

(3)　n_m と l は共に 0 以上の整数なので，λ は自然数．前問より

$\lambda = n_m + l + 1 =: n_p$ なので，λ の定義より

$$\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0\hbar}\sqrt{\frac{m}{-2E}} = n_p \Rightarrow E = -\frac{me^4}{32\pi^2\varepsilon_0^2\hbar^2}\cdot\frac{1}{n_p^2}$$

（※水素原子のエネルギー準位）