量子力学 2 演習　　レポート問題 No.2　01/7/12

(提出期限：9 月 6 日午後 5 時. 提出場所は B424.)

1. 水素原子の基底状態の波動関数は座標表示で

$$\langle \mathbf{r}|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{\pi}} a_0^{-3/2} \exp\left(-\frac{r}{a_0}\right)$$

と与えられる。この状態の運動量の確率分布を求めたい。

(a) 運動量表示の波動関数 $\langle \mathbf{p}|\psi\rangle$ を座標表示の波動関数 $\langle \mathbf{r}|\psi\rangle$ の Fourier 変換の形で表わせ。ただし、規格化は $\langle \mathbf{p}|\mathbf{p}'\rangle = \delta^3(\mathbf{p}-\mathbf{p}')$ とする。

(b) 運動量を d^3p に見出す確率を求めよ。(ヒント：必要な積分は $\mathbf{p}$ の方向を z 軸とする極座標で実行するとよい。)

2. Wigner-Eckart の定理を用いて、行列要素 $\langle \varphi; j_2, m_2|\hat{x}|\psi; j_1, m_1\rangle$ に対する選択則を導け。$j_1 = 0$、$j_2 = 0$ は許されるか。(ヒント：$\hat{x}$ はベクトル演算子の 1 成分である。)

3. N 個の粒子からなる孤立系を考える。空間が一様等方であるならば、この系は回転と並進に対して不変である。

(a) 古典的には、各粒子の位置および運動量は回転と並進で次のように変化する。

$$\boldsymbol{r}_i \mapsto M\boldsymbol{r}_i + \boldsymbol{a}\ ,\ \ \boldsymbol{p}_i \mapsto M\boldsymbol{p}_i\ \ (i = 1, 2, \cdots N) \tag{1}$$

ただし、M は 3 行 3 列の直交行列で、$\boldsymbol{a}$ は 3 成分の定ベクトルである。量子力学でこれに対応する変換として、ユニタリー演算子 $\hat{U}(M, \boldsymbol{a})$ を考え、状態 $|\psi\rangle$ を $\hat{U}(M, \boldsymbol{a})|\psi\rangle$ に写すものとする。このとき、変換 (1) が期待値の意味で成り立つためには、位置および運動量の演算子 $\hat{\boldsymbol{r}}_i$、$\hat{\boldsymbol{p}}_i$ はどのように変換するべきか。

(b) 具体的に $\hat{U}(M, \boldsymbol{a})$ を構成するために無限小変換を考える。すなわち、

$$\begin{aligned} \boldsymbol{r}_i &\mapsto M(\boldsymbol{\theta})\boldsymbol{r}_i + \boldsymbol{\epsilon} = \boldsymbol{r}_i + \boldsymbol{\theta}\times\boldsymbol{r}_i + \boldsymbol{\epsilon} + O(\boldsymbol{\theta}^2) \\ \boldsymbol{p}_i &\mapsto M(\boldsymbol{\theta})\boldsymbol{p}_i = \boldsymbol{p}_i + \boldsymbol{\theta}\times\boldsymbol{p}_i + O(\boldsymbol{\theta}^2) \end{aligned} \tag{2}$$

である。対応する $\hat{U}$ は、

$$\hat{U}(M(\boldsymbol{\theta}), \boldsymbol{\epsilon}) = 1 + \frac{1}{i\hbar}\boldsymbol{\theta}\cdot\hat{\boldsymbol{J}} + \frac{1}{i\hbar}\boldsymbol{\epsilon}\cdot\hat{\boldsymbol{P}} + O(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\epsilon}\text{の 2 次})$$

と書ける。ここで $\hat{\boldsymbol{J}}$、$\hat{\boldsymbol{P}}$ は回転および並進の生成子であり、エルミートである。前問の結果を用いて、次の交換関係を求めよ。

$$[\hat{r}_i^a, \hat{P}^b],\ [\hat{p}_i^a, \hat{P}^b],\ [\hat{r}_i^a, \hat{J}^b],\ [\hat{p}_i^a, \hat{J}^b]$$

(c) $\hat{\boldsymbol{P}} = \sum_{i=1}^N \hat{\boldsymbol{p}}_i$、$\hat{\boldsymbol{J}} = \sum_{i=1}^N \hat{\boldsymbol{r}}_i \times \hat{\boldsymbol{p}}_i$ とすると、前問で得られた交換関係が満たされていることを示せ。

(d) 前問で定義された $\hat{\boldsymbol{P}}$、$\hat{\boldsymbol{J}}$ を用いて、$[\hat{J}^a, \hat{J}^b]$、$[\hat{J}^a, \hat{P}^b]$、$[\hat{P}^a, \hat{P}^b]$ を計算せよ。

http://www-het.phys.sci.osaka-u.ac.jp/tanaka/qm2.html