量子力学 III, 物質設計学 I　レポート課題 II　解答例

p.26 二粒子ボース系におけるスピンの偶奇性と空間部分の対称性

$$\phi_{S=\mathrm{even}}(\boldsymbol{r}_2,\boldsymbol{r}_1)=\phi_{S=\mathrm{even}}(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2),\quad \phi_{S=\mathrm{odd}}(\boldsymbol{r}_2,\boldsymbol{r}_1)=-\phi_{S=\mathrm{odd}}(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)$$

フェルミオンのとき (講義ノート（1.82）式) と関係は同じ。

p.26 $\mathbf{p}^2$ に関する問題

1. 軌道が 3 つ、スピンが二通りなので、1 粒子状態は 6 つ。よって ${}_6C_2=15$ 通りである。

2. 15 個の二粒子状態を全て並べる。その際スレーター行列式はすでに $\hat{L}_z$,　$\hat{S}_z$ について固有関数になっているので、固有値 L_z,　S_z によって状態を分類しておく。

$$\begin{array}{llllll}
L_z=2, & S_z=0, & \Phi_{1\uparrow 1\downarrow} & & \\
L_z=1, & S_z=1, & \Phi_{1\uparrow 0\uparrow} & & \\
 & S_z=0, & \Phi_{1\uparrow 0\downarrow} & \Phi_{1\downarrow 0\uparrow} & \\
 & S_z=-1, & \Phi_{1\downarrow 0\downarrow} & & \\
L_z=0, & S_z=1, & \Phi_{1\uparrow -1\uparrow} & & \\
 & S_z=0, & \Phi_{1\uparrow -1\downarrow}, & \Phi_{1\downarrow -1\uparrow}, & \Phi_{0\uparrow 0\downarrow} \\
 & S_z=-1, & \Phi_{1\downarrow -1\downarrow} & & \\
L_z=-1, & S_z=1, & \Phi_{0\uparrow -1\uparrow} & & \\
 & S_z=0, & \Phi_{0\uparrow -1\downarrow} & \Phi_{0\downarrow -1\uparrow} & \\
 & S_z=-1, & \Phi_{0\downarrow -1\downarrow} & & \\
L_z=-2, & S_z=0, & \Phi_{-1\uparrow -1\downarrow} & &
\end{array} \tag{1}$$

このように分類すると $S_z=0$ 以外の波動関数はそれ自身で $\hat{\boldsymbol{S}}^2$, $\hat{S}_z$,$\hat{\boldsymbol{L}}^2\hat{L}_z$ の同時固有関数であることがわかる．$L_z=1$,　$S_z=0$ の状態は

1 粒子の軌道角運動量が 1 の状態を合成したので、全軌道角運動量の大きさは、$0,1,2$ のいずれかである。このことから、$L_z=\pm 2$ の状態は $L=2$ の状態であることがわかる．また

$$\Phi_{1\uparrow 1\downarrow}(\xi_1,\xi_2)=\phi_1(\boldsymbol{r}_1)\phi_1(\boldsymbol{r}_2)\frac{\alpha(\sigma_1)\beta(\sigma_2)-\alpha(\sigma_2)\beta(\sigma_1)}{\sqrt{2}}=\phi_1(\boldsymbol{r}_1)\phi_1(\boldsymbol{r}_2)\chi_{\mathrm{s}}(\sigma_1,\sigma_2)$$

と書き直すことができるので波動関数のスピン部分から $S=S_z=0$ の状態であることもわかる。同じ L を持ち、L_z の異なる状態を生成する関係式

$$|L,L_z-1\rangle=\frac{\hat{L}_-|L,L_z\rangle}{\sqrt{(L+L_z)(L-L_z+1)}\hbar} \tag{2}$$

を用いると用いると以下の状態を得る.

$$
\begin{array}{llll}
L=2, & L_z=2, & S=S_z=0 & \phi_1(\boldsymbol{r}_1)\phi_1(\boldsymbol{r}_2)\chi_{\mathrm{s}} \\
L=2, & L_z=1, & S=S_z=0 & \frac{\phi_1(\boldsymbol{r}_1)\phi_0(\boldsymbol{r}_2)+\phi_0(\boldsymbol{r}_1)\phi_1(\boldsymbol{r}_2)}{\sqrt{2}}\chi_{\mathrm{s}} \\
L=2, & L_z=0, & S=S_z=0 & \frac{\phi_1(\boldsymbol{r}_1)\phi_{-1}(\boldsymbol{r}_2)+2\phi_0(\boldsymbol{r}_1)\phi_0(\boldsymbol{r}_2)+\phi_{-1}(\boldsymbol{r}_1)\phi_1(\boldsymbol{r}_2)}{\sqrt{6}}\chi_{\mathrm{s}} \\
L=2, & L_z=-1, & S=S_z=0 & \frac{\phi_{-1}(\boldsymbol{r}_1)\phi_0(\boldsymbol{r}_2)+\phi_0(\boldsymbol{r}_1)\phi_{-1}(\boldsymbol{r}_2)}{\sqrt{2}}\chi_{\mathrm{s}} \\
L=2, & L_z=-2, & S=S_z=0 & \phi_{-1}(\boldsymbol{r}_1)\phi_{-1}(\boldsymbol{r}_2)\chi_{\mathrm{s}}.
\end{array}
\tag{3}
$$

さて $L_z=1, S_z=1$ の状態

$$
\Phi_{1\uparrow 0\uparrow}=\frac{\phi_1(\boldsymbol{r}_1)\phi_0(\boldsymbol{r}_2)-\phi_0(\boldsymbol{r}_1)\phi_1(\boldsymbol{r}_2)}{\sqrt{2}}\alpha(\sigma_1)\alpha(\sigma_2)
$$

は $L=S=1$ の状態であることがわかる．これと (2) と (1.78) より $L=S=1$ の状態

$$
\left\{\begin{array}{ll}
L_z=1, & \frac{\phi_1(\boldsymbol{r}_1)\phi_0(\boldsymbol{r}_2)-\phi_0(\boldsymbol{r}_1)\phi_1(\boldsymbol{r}_2)}{\sqrt{2}} \\
L_z=0, & \frac{\phi_1(\boldsymbol{r}_1)\phi_{-1}(\boldsymbol{r}_2)-\phi_{-1}(\boldsymbol{r}_1)\phi_1(\boldsymbol{r}_2)}{\sqrt{2}} \\
L_z=-1, & \frac{\phi_{-1}(\boldsymbol{r}_1)\phi_0(\boldsymbol{r}_2)-\phi_0(\boldsymbol{r}_1)\phi_{-1}(\boldsymbol{r}_2)}{\sqrt{2}}
\end{array}\right\}
\left\{\begin{array}{ll}
S_z=1, & \alpha(\sigma_1)\alpha(\sigma_2) \\
S_z=0, & \frac{\alpha(\sigma_1)\beta(\sigma_2)+\beta(\sigma_1)\alpha(\sigma_2)}{\sqrt{2}} \\
S_z=-1, & \beta(\sigma_1)\beta(\sigma_2)
\end{array}\right\}
\tag{4}
$$

を得る。ここまでで 14 状態を分類した。残りの一つはこれら全てと直交する状態

$$
\frac{\phi_1(\boldsymbol{r}_1)\phi_{-1}(\boldsymbol{r}_2)-\phi_0(\boldsymbol{r}_1)\phi_0(\boldsymbol{r}_2)+\phi_{-1}(\boldsymbol{r}_1)\phi_1(\boldsymbol{r}_2)}{\sqrt{3}}\chi_{\mathrm{s}}
\tag{5}
$$

で与えられる。これが $L=L_z=S=S_z=0$ の状態を表すことは確かめることができる。(3), (4), (5) で 15 の状態をすべて角運動量の固有状態として分類できたことになる.

3. $r=|\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2|$ として

$$
\frac{\partial v}{\partial x_1}=\frac{x_1-x_2}{r}\frac{\mathrm{d}v}{\mathrm{d}r}\quad ,\frac{\partial v}{\partial y_1}=\frac{y_1-y_2}{r}\frac{\mathrm{d}v}{\mathrm{d}r}
$$

より

$$
\left[\hat{l}_{1z},\hat{v}\right]=\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{y_1x_2-x_1y_2}{r}\frac{\mathrm{d}v}{\mathrm{d}r},\quad \left[\hat{l}_{2z},\hat{v}\right]=\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{y_2x_1-x_2y_1}{r}\frac{\mathrm{d}v}{\mathrm{d}r}
$$

これより

$$
\left[\hat{L}_z,\hat{v}\right]=0
$$

同様にして

$$
\left[\hat{L}_x,\hat{v}\right]=0,\quad \left[\hat{L}_y,\hat{v}\right]=0
$$

4.

$$
\left[\hat{L}_\mu^2,\hat{v}\right]=\hat{L}_z\left[\hat{L}_z,\hat{v}\right]+\left[\hat{L}_z,\hat{v}\right]\hat{L}_z=0
$$

より

$$
\left[\hat{\boldsymbol{L}}^2,\hat{v}\right]=\sum_{\mu=x,y,z}\left[\hat{L}_\mu^2,\hat{v}\right]=0
$$

5. 15 縮退が解けて、$L=2, S=0$ の 5 重縮退と $L=S=1$ の 9 重縮退と、$L=S=0$ の一重縮退の準位に分裂する。

$$E_{L=2,S=0} = \int \mathrm{d}\boldsymbol{r}_1 \int \mathrm{d}\boldsymbol{r}_2 |\phi_1(\boldsymbol{r}_1)|^2 |\phi_1(\boldsymbol{r}_2)|^2 v(|\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2|)$$

$$E_{L=1,S=1} = \int \mathrm{d}\boldsymbol{r}_1 \int \mathrm{d}\boldsymbol{r}_2 \frac{|\phi_1(\boldsymbol{r}_1)\phi_0(\boldsymbol{r}_2) - \phi_0(\boldsymbol{r}_1)\phi_1(\boldsymbol{r}_2)|^2}{2} v(|\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2|)$$

$$E_{L=0,S=0} = \int \mathrm{d}\boldsymbol{r}_1 \int \mathrm{d}\boldsymbol{r}_2 \frac{|\phi_1(\boldsymbol{r}_1)\phi_{-1}(\boldsymbol{r}_2) - \phi_0(\boldsymbol{r}_1)\phi_0(\boldsymbol{r}_2) + \phi_{-1}(\boldsymbol{r}_1)\phi_1(\boldsymbol{r}_2)|^2}{3} v(|\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2|)$$

この問題において、分類の結果得られる状態は、角運動量の合成で与えられる状態のうち L, S ともに奇数、偶数のものに限られることがわかる。また縮退した準位をあらかじめ角運動量の固有状態として分類しておくと、そのまま角運動量と可換な摂動がかかった場合の分裂後の固有状態となるので、永年方程式を解く必要がなくなる。