演習問題

2024 年 7 月 4 日　　学籍番号 ＿＿＿＿＿＿＿＿　　氏名 ＿＿＿＿＿＿＿＿

[問 1]　全角運動量の二乗に対する表式

$$L^2 = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} \right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\phi^2} \right],$$

を導こう。

(1)　角運動量

$$\boldsymbol{L} = -i\hbar \boldsymbol{r} \times \nabla,$$

に対し、$\boldsymbol{r} = r\boldsymbol{e}_r$ および

$$\nabla = \boldsymbol{e}_r \frac{\partial}{\partial r} + \boldsymbol{e}_\theta \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial\theta} + \boldsymbol{e}_\phi \frac{1}{r\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\phi},$$

を用いて、

$$\boldsymbol{L} = -i\hbar \left(\boldsymbol{e}_\phi \frac{\partial}{\partial\theta} - \boldsymbol{e}_\theta \frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\phi} \right),$$

を示せ。

(2)　(1) の結果に、極座標における基底ベクトルと直交座標における基底ベクトルの関係

$$\begin{aligned} \boldsymbol{e}_r &= \sin\theta\cos\phi\, \boldsymbol{e}_x + \sin\theta\sin\phi\, \boldsymbol{e}_y + \cos\theta\, \boldsymbol{e}_z, \\ \boldsymbol{e}_\theta &= \cos\theta\cos\phi\, \boldsymbol{e}_x + \cos\theta\sin\phi\, \boldsymbol{e}_y - \sin\theta\, \boldsymbol{e}_z, \\ \boldsymbol{e}_\phi &= -\sin\phi\, \boldsymbol{e}_x + \cos\phi\, \boldsymbol{e}_y, \end{aligned}$$

を用いると

$$\boldsymbol{L} = -i\hbar \left[\boldsymbol{e}_x \left(-\sin\phi \frac{\partial}{\partial\theta} - \frac{\cos\phi}{\tan\theta} \frac{\partial}{\partial\phi} \right) + \boldsymbol{e}_y \left(\cos\phi \frac{\partial}{\partial\theta} - \frac{\sin\phi}{\tan\theta} \frac{\partial}{\partial\phi} \right) + \boldsymbol{e}_z \frac{\partial}{\partial\phi} \right],$$

となる。これを用いて、昇降演算子の表式

$$L_\pm = L_x \pm iL_y = \pm\hbar e^{\pm i\phi} \left(\frac{\partial}{\partial\theta} \pm \frac{i}{\tan\theta} \frac{\partial}{\partial\phi} \right),$$

を示せ。

(3)　昇降演算子の積が

$$L_\pm L_\mp = -\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \frac{1}{\tan\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{\tan^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\phi^2} \pm i \frac{\partial}{\partial\phi} \right),$$

となることを示し、$L^2 = L_\pm L_\mp + L_z^2 \mp \hbar L_z$ と合わせて

$$L^2 = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} \right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\phi^2} \right],$$

を示せ。

[解 1]

(1)　題意より

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{L} &= -i\hbar r\boldsymbol{e}_r \times \left(\boldsymbol{e}_r \frac{\partial}{\partial r} + \boldsymbol{e}_\theta \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta} + \boldsymbol{e}_\phi \frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\right) \\
&= -i\hbar r\left((\boldsymbol{e}_r \times \boldsymbol{e}_r)\frac{\partial}{\partial r} + (\boldsymbol{e}_r \times \boldsymbol{e}_\theta)\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta} + \left(\boldsymbol{e}_r \times \boldsymbol{e}_\phi\right)\frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\right) \\
&= -i\hbar r\left(0\frac{\partial}{\partial r} + \boldsymbol{e}_\phi \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta} - \boldsymbol{e}_\theta \frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\right) \\
&= -i\hbar\left(\boldsymbol{e}_\phi \frac{\partial}{\partial\theta} - \boldsymbol{e}_\theta \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\right),
\end{aligned}
$$

となる。

(2)　題意より

$$
L_x = -i\hbar\left(-\sin\phi\frac{\partial}{\partial\theta} - \frac{\cos\phi}{\tan\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\right), \qquad L_y = -i\hbar\left(\cos\phi\frac{\partial}{\partial\theta} - \frac{\sin\phi}{\tan\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\right), \qquad L_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\phi},
$$

であるから、昇降演算子は

$$
L_\pm = L_x \pm iL_y = -i\hbar\left(-\sin\phi\frac{\partial}{\partial\theta} - \frac{\cos\phi}{\tan\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\right) \pm \hbar\left(\cos\phi\frac{\partial}{\partial\theta} - \frac{\sin\phi}{\tan\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\right) = \pm\hbar e^{\pm i\phi}\left(\frac{\partial}{\partial\theta} \pm \frac{i}{\tan\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\right),
$$

となる。

(3)　(2) の結果より、昇降演算子の積は

$$
L_\pm L_\mp = -\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \frac{1}{\tan\theta}\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{\tan^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2} \pm i\frac{\partial}{\partial\phi}\right),
$$

となる。これと $L^2 = L_\pm L_\mp + L_z^2 \mp \hbar L_z$ より、

$$
\begin{aligned}
L^2 &= -\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \frac{1}{\tan\theta}\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{\tan^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2} \pm i\frac{\partial}{\partial\phi}\right) + \left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial\phi}\right)^2 \mp \hbar\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial\phi}\right) \\
&= -\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \frac{1}{\tan\theta}\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right) \\
&= -\hbar^2\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right],
\end{aligned}
$$

を得る。

[問 2]　スピン演算子 $\hat{S}_x, \hat{S}_y, \hat{S}_z$ が Pauli 行列

$$
\sigma_x := \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \qquad \sigma_y := \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \qquad \sigma_z := \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix},
$$

を用いて

$$
\hat{S}_x \overset{\text{表示}}{=} \frac{\hbar}{2}\sigma_x, \qquad \hat{S}_y \overset{\text{表示}}{=} \frac{\hbar}{2}\sigma_y, \qquad \hat{S}_z \overset{\text{表示}}{=} \frac{\hbar}{2}\sigma_z,
$$

と与えられている。

(1)　Pauli 行列が

$$\sigma_j \sigma_k = \delta_{jk} + i \sum_l \epsilon_{jkl} \sigma_l,$$

を満たすことを示せ。ここで **Levi-Civita 記号** ϵ_{jkl} は

$$\epsilon_{jkl} := \begin{cases} +1 & (j,k,l) = (1,2,3),\ (2,3,1),\ (3,1,2), \\ -1 & (j,k,l) = (1,3,2),\ (2,1,3),\ (3,2,1), \\ 0 & \text{他}, \end{cases}$$

で定義される。

(2)　スピン演算子の満たすべき交換関係

$$[\hat{S}_x, \hat{S}_y] = i\hbar \hat{S}_z, \qquad [\hat{S}_y, \hat{S}_z] = i\hbar \hat{S}_x, \qquad [\hat{S}_z, \hat{S}_x] = i\hbar \hat{S}_y,$$

が満たされていることを、行列を計算することにより示せ。

[解 2]

(1)　題意の式は

$$\sigma_x^2 = \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = 1,$$
$$\sigma_x \sigma_y = -\sigma_y \sigma_x = i\sigma_z, \qquad \sigma_y \sigma_z = -\sigma_z \sigma_y = i\sigma_x, \qquad \sigma_z \sigma_x = -\sigma_x \sigma_z = i\sigma_y,$$

となる。1 行目については Pauli 行列を二乗することにより示される。2 行目については

$$\sigma_x \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} = i \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = i\sigma_z, \qquad \sigma_y \sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = -i \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = -i\sigma_z,$$
$$\sigma_y \sigma_z = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = i \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = i\sigma_x, \qquad \sigma_z \sigma_y = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} = -i \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = -i\sigma_x,$$
$$\sigma_z \sigma_x = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = i \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} = i\sigma_y, \qquad \sigma_x \sigma_z = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = -i \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} = -i\sigma_y,$$

より示される。

(2)　(1) より

$$[\sigma_x, \sigma_y] = 2i\sigma_z, \qquad [\sigma_y, \sigma_z] = 2i\sigma_x, \qquad [\sigma_z, \sigma_x] = 2i\sigma_y,$$

であるから、

$$[\hat{S}_x, \hat{S}_y] = \left(\frac{\hbar}{2}\right)^2 [\sigma_x, \sigma_y] = \frac{i\hbar^2}{2}\sigma_z = i\hbar\hat{S}_z,$$
$$[\hat{S}_y, \hat{S}_z] = \left(\frac{\hbar}{2}\right)^2 [\sigma_y, \sigma_z] = \frac{i\hbar^2}{2}\sigma_x = i\hbar\hat{S}_x,$$
$$[\hat{S}_z, \hat{S}_x] = \left(\frac{\hbar}{2}\right)^2 [\sigma_z, \sigma_x] = \frac{i\hbar^2}{2}\sigma_y = i\hbar\hat{S}_y,$$

と示される。

[問 3]　電子のスピン状態 $|\chi\rangle$ が

$$|\chi\rangle \overset{\text{表示}}{=} A \begin{pmatrix} 3i \\ 4 \end{pmatrix},$$

で与えられているとする。

(1)　状態 $|\chi\rangle$ を規格化することで定数 A を求めよ。ただし A は正の実数とする。

(2)　この状態に対するスピン $\hat{S}_x, \hat{S}_y, \hat{S}_z$ の期待値を求めよ。ただし $\hat{S}_x, \hat{S}_y, \hat{S}_z$ は [問 2] のように与えられているとする。

(3)　分散 $\sigma_{S_x}^2, \sigma_{S_y}^2, \sigma_{S_z}^2$ の平方根 $\sigma_{S_x}, \sigma_{S_y}, \sigma_{S_z}$ を求めよ。

(4)　不確定性関係

$$\sigma_A^2\sigma_B^2 \geq \left(\frac{1}{2i}\langle\chi|[\hat{A}, \hat{B}]|\chi\rangle\right)^2,$$

が $\hat{A} = \hat{S}_x, \hat{B} = \hat{S}_y$ に対して成り立っていることを示せ。

[解 3]

(1)

$$\langle\chi|\chi\rangle \overset{\text{表示}}{=} A^2 \begin{pmatrix} -3i & 4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 3i \\ 4 \end{pmatrix} = 25A^2 = 1, \qquad \Longrightarrow \qquad A = \frac{1}{5}.$$

(2)

$$\langle\chi|\hat{S}_x|\chi\rangle \overset{\text{表示}}{=} A^2 \begin{pmatrix} -3i & 4 \end{pmatrix} \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 3i \\ 4 \end{pmatrix} = 0,$$
$$\langle\chi|\hat{S}_y|\chi\rangle \overset{\text{表示}}{=} A^2 \begin{pmatrix} -3i & 4 \end{pmatrix} \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 3i \\ 4 \end{pmatrix} = -\frac{12}{25}\hbar,$$
$$\langle\chi|\hat{S}_z|\chi\rangle \overset{\text{表示}}{=} A^2 \begin{pmatrix} -3i & 4 \end{pmatrix} \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 3i \\ 4 \end{pmatrix} = -\frac{7}{50}\hbar,$$

(3)

$$\sigma_{S_x}^2 = \langle\chi|(\hat{S}_x - \langle\chi|\hat{S}_x|\chi\rangle)^2|\chi\rangle = \langle\chi|\hat{S}_x^2|\chi\rangle - \langle\chi|\hat{S}_x|\chi\rangle^2$$

$$\overset{\text{表示}}{=} A^2 \begin{pmatrix} -3i & 4 \end{pmatrix} \left(\frac{\hbar}{2}\right)^2 \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}^2 \begin{pmatrix} 3i \\ 4 \end{pmatrix} - 0^2 = \frac{\hbar^2}{4} \quad \Longrightarrow \quad \sigma_{S_x} = \frac{\hbar}{2},$$

$$\sigma_{S_y}^2 = \langle\chi|(\hat{S}_y - \langle\chi|\hat{S}_y|\chi\rangle)^2|\chi\rangle = \langle\chi|\hat{S}_y^2|\chi\rangle - \langle\chi|\hat{S}_y|\chi\rangle^2$$

$$\overset{\text{表示}}{=} A^2 \begin{pmatrix} -3i & 4 \end{pmatrix} \left(\frac{\hbar}{2}\right)^2 \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}^2 \begin{pmatrix} 3i \\ 4 \end{pmatrix} - \left(-\frac{12}{25}\hbar\right)^2 = \frac{49}{2500}\hbar^2 \quad \Longrightarrow \quad \sigma_{S_y} = \frac{7}{50}\hbar,$$

$$\sigma_{S_z}^2 = \langle\chi|(\hat{S}_z - \langle\chi|\hat{S}_z|\chi\rangle)^2|\chi\rangle = \langle\chi|\hat{S}_z^2|\chi\rangle - \langle\chi|\hat{S}_z|\chi\rangle^2$$

$$\overset{\text{表示}}{=} A^2 \begin{pmatrix} -3i & 4 \end{pmatrix} \left(\frac{\hbar}{2}\right)^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}^2 \begin{pmatrix} 3i \\ 4 \end{pmatrix} - \left(-\frac{7}{50}\hbar\right)^2 = \frac{576}{2500}\hbar^2 \quad \Longrightarrow \quad \sigma_{S_z} = \frac{12}{25}\hbar.$$

(4) $\hat{A} = \hat{S}_x, \hat{B} = \hat{S}_y$ に対する不確定性関係は

$$\sigma_{S_x}^2 \sigma_{S_y}^2 \geq \left(\frac{1}{2i}\langle\chi|[\hat{S}_x, \hat{S}_y]|\chi\rangle\right)^2 = \left(\frac{\hbar}{2}\langle\chi|\hat{S}_z|\chi\rangle\right)^2,$$

であるが、

$$\sigma_{S_x}^2 \sigma_{S_y}^2 = \left(\frac{7}{100}\hbar^2\right)^2 \geq \left(\frac{\hbar}{2}\langle\chi|\hat{S}_z|\chi\rangle\right)^2 = \left(\frac{7}{100}\hbar^2\right)^2,$$

より確かに成り立っている。