演習問題

2024 年 7 月 11 日　　学籍番号 ＿＿＿＿＿＿＿＿＿＿　　氏名 ＿＿＿＿＿＿＿＿＿＿

[問 1]　Larmor 歳差運動の時間発展を計算しよう。Hamiltonian および Schrödinger 方程式は

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\chi(t)\rangle = \hat{H}|\chi(t)\rangle, \qquad \hat{H} = -\gamma\hat{\boldsymbol{S}}\cdot\boldsymbol{B},$$

で与えられ、外部から印加された磁束密度 $\boldsymbol{B}$ は

$$B_x = 0, \qquad B_y = 0, \qquad B_z = B_0,$$

とする。また、スピン演算子は

$$\hat{S}_x \overset{\text{表示}}{=} \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \qquad \hat{S}_y \overset{\text{表示}}{=} \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \qquad \hat{S}_z \overset{\text{表示}}{=} \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix},$$

で与えられる。

(1)　Hamiltonian の固有状態が

$$|\chi_+\rangle \overset{\text{表示}}{=} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \qquad |\chi_-\rangle \overset{\text{表示}}{=} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix},$$

で与えられることを示し、対応するエネルギー固有値を求めよ。

(2)　初期状態

$$|\chi(t=0)\rangle \overset{\text{表示}}{=} \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{\alpha}{2}\right) \\ e^{i\delta}\sin\left(\frac{\alpha}{2}\right) \end{pmatrix},$$

に対し、一般の時刻 t における状態 $|\chi(t)\rangle$ を求めよ。

(3)　時刻 t におけるスピンの期待値 $\langle\chi(t)|\hat{S}_x|\chi(t)\rangle, \langle\chi(t)|\hat{S}_y|\chi(t)\rangle, \langle\chi(t)|\hat{S}_z|\chi(t)\rangle$ を求め、歳差運動の角振動数を求めよ。また、時刻 t において $\hat{S}_x$ を測定したとき、測定値 $+\frac{\hbar}{2}$ を得る確率および $-\frac{\hbar}{2}$ を得る確率をそれぞれ求めよ。

[解 1]

(1)　Hamiltonian は

$$\hat{H} \overset{\text{表示}}{=} -\frac{\hbar}{2}\gamma B_0\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix},$$

であるから、

$$\hat{H}|\chi_+\rangle \overset{\text{表示}}{=} -\frac{\hbar}{2}\gamma B_0\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = -\frac{\hbar}{2}\gamma B_0\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \qquad \hat{H}|\chi_-\rangle \overset{\text{表示}}{=} +\frac{\hbar}{2}\gamma B_0\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = +\frac{\hbar}{2}\gamma B_0\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix},$$

より確かに $|\chi_\pm\rangle$ は Hamiltonian の固有状態であり、対応する固有値は $E_\pm := \mp\frac{\hbar}{2}\gamma B_0$ である。

(2) それぞれのエネルギー固有状態は $e^{-\frac{iEt}{\hbar}}$ で時間発展するから、

$$|\chi(t)\rangle = e^{-\frac{iE_+t}{\hbar}}\cos\left(\frac{\alpha}{2}\right)|\chi_+\rangle + e^{-\frac{iE_-t}{\hbar}}e^{i\delta}\sin\left(\frac{\alpha}{2}\right)|\chi_-\rangle \overset{\text{表示}}{=} \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{\alpha}{2}\right)e^{\frac{i\gamma B_0 t}{2}} \\ e^{i\delta}\sin\left(\frac{\alpha}{2}\right)e^{-\frac{i\gamma B_0 t}{2}} \end{pmatrix},$$

となる。

(3) スピンの期待値は

$$\langle\chi(t)|\hat{S}_x|\chi(t)\rangle \overset{\text{表示}}{=} \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{\alpha}{2}\right)e^{-\frac{i\gamma B_0 t}{2}} & e^{-i\delta}\sin\left(\frac{\alpha}{2}\right)e^{\frac{i\gamma B_0 t}{2}} \end{pmatrix}\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \cos\left(\frac{\alpha}{2}\right)e^{\frac{i\gamma B_0 t}{2}} \\ e^{i\delta}\sin\left(\frac{\alpha}{2}\right)e^{-\frac{i\gamma B_0 t}{2}} \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}\sin\alpha\cos(\gamma B_0 t - \delta),$$

$$\langle\chi(t)|\hat{S}_y|\chi(t)\rangle \overset{\text{表示}}{=} \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{\alpha}{2}\right)e^{-\frac{i\gamma B_0 t}{2}} & e^{-i\delta}\sin\left(\frac{\alpha}{2}\right)e^{\frac{i\gamma B_0 t}{2}} \end{pmatrix}\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \cos\left(\frac{\alpha}{2}\right)e^{\frac{i\gamma B_0 t}{2}} \\ e^{i\delta}\sin\left(\frac{\alpha}{2}\right)e^{-\frac{i\gamma B_0 t}{2}} \end{pmatrix} = -\frac{\hbar}{2}\sin\alpha\sin(\gamma B_0 t - \delta),$$

$$\langle\chi(t)|\hat{S}_z|\chi(t)\rangle \overset{\text{表示}}{=} \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{\alpha}{2}\right)e^{-\frac{i\gamma B_0 t}{2}} & e^{-i\delta}\sin\left(\frac{\alpha}{2}\right)e^{\frac{i\gamma B_0 t}{2}} \end{pmatrix}\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \cos\left(\frac{\alpha}{2}\right)e^{\frac{i\gamma B_0 t}{2}} \\ e^{i\delta}\sin\left(\frac{\alpha}{2}\right)e^{-\frac{i\gamma B_0 t}{2}} \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}\cos\alpha,$$

となるので、歳差運動の角振動数は $\omega = \gamma B_0$ である。また、$|\chi(t)\rangle$ を $\hat{S}_x$ の固有値 $\pm\frac{\hbar}{2}$ の固有状態

$$|\chi_+^{(x)}\rangle \overset{\text{表示}}{=} \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \qquad |\chi_-^{(x)}\rangle \overset{\text{表示}}{=} \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix},$$

を用いて表すと

$$|\chi(t)\rangle = \frac{\cos\left(\frac{\alpha}{2}\right)e^{\frac{i\gamma B_0 t}{2}} + e^{i\delta}\sin\left(\frac{\alpha}{2}\right)e^{-\frac{i\gamma B_0 t}{2}}}{\sqrt{2}}|\chi_+^{(x)}\rangle + \frac{\cos\left(\frac{\alpha}{2}\right)e^{\frac{i\gamma B_0 t}{2}} - e^{i\delta}\sin\left(\frac{\alpha}{2}\right)e^{-\frac{i\gamma B_0 t}{2}}}{\sqrt{2}}|\chi_-^{(x)}\rangle,$$

であるから、測定値 $\pm\frac{\hbar}{2}$ を得る確率 $P_\pm^{(x)}(t)$ はそれぞれ

$$P_+^{(x)}(t) = \left|\frac{\cos\left(\frac{\alpha}{2}\right)e^{\frac{i\gamma B_0 t}{2}} + e^{i\delta}\sin\left(\frac{\alpha}{2}\right)e^{-\frac{i\gamma B_0 t}{2}}}{\sqrt{2}}\right|^2 = \frac{1}{2} + \frac{1}{2}\sin\alpha\cos(\gamma B_0 t - \delta),$$

$$P_-^{(x)}(t) = \left|\frac{\cos\left(\frac{\alpha}{2}\right)e^{\frac{i\gamma B_0 t}{2}} - e^{i\delta}\sin\left(\frac{\alpha}{2}\right)e^{-\frac{i\gamma B_0 t}{2}}}{\sqrt{2}}\right|^2 = \frac{1}{2} - \frac{1}{2}\sin\alpha\cos(\gamma B_0 t - \delta),$$

となる。

[問 2] Stern-Gerlach の実験を Schrödinger 方程式から記述しよう。以下、空間は x, z 方向だけを考える。Hamiltonian および Schrödinger 方程式は

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\Psi(t)\rangle = \hat{H}|\Psi(t)\rangle, \qquad \hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} - \gamma\hat{\boldsymbol{S}}\cdot\boldsymbol{B},$$

で与えられ、$\hat{p}^2 = \hat{p}_x^2 + \hat{p}_z^2$ である。また $\boldsymbol{B}$ は外部から印加された磁束密度であり、B_0, α を定数として

$$B_x = -\alpha x, \qquad B_z = B_0 + \alpha z,$$

とする。空間に関しては $\{|x,z\rangle\}$ 表示、スピンに関しては $\{|\chi_\pm\rangle\}$ 表示を用いると、

$$|\Psi(t)\rangle \overset{\text{表示}}{=} \begin{pmatrix} \Psi_+(t,x,z) \\ \Psi_-(t,x,z) \end{pmatrix}, \qquad \hat{p}_x \overset{\text{表示}}{=} -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}, \qquad \hat{p}_z \overset{\text{表示}}{=} -i\hbar\frac{\partial}{\partial z}, \qquad \hat{S}_x \overset{\text{表示}}{=} \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \qquad \hat{S}_z \overset{\text{表示}}{=} \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix},$$

であることに注意して、以下の問いに答えよ。

(1)　上記の表示を Schrödinger 方程式に代入することにより、$\Psi_\pm(t,x,z)$ に対する方程式を導け。

(2)　(1) で得られた方程式を簡潔にするため

$$\Psi_\pm(t,x,z) =: e^{\pm\frac{i\gamma B_0 t}{2}}\tilde{\Psi}_\pm(t,x,z),$$

とする。$\tilde{\Psi}_\pm(t,x,z)$ に対する方程式を導け。

(3)　B_0 が大きい場合、(2) で求めた方程式のうち $e^{\pm i\gamma B_0 t}$ を含む部分は激しく振動しキャンセルするため無視してよい。このとき、$\tilde{\Psi}_\pm(t,x,z)$ に対する方程式は

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\tilde{\Psi}_\pm(t,x,z) = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\tilde{\Psi}_\pm(t,x,z) + V_\pm(x,z)\tilde{\Psi}_\pm(t,x,z),$$

の形に帰着する。$V_\pm(x,z)$ を求め、軌道が分離することを説明せよ。

[解 2]

(1)　与えられた表式を Schrödinger 方程式に代入し、

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\begin{pmatrix} \Psi_+(t,x,z) \\ \Psi_-(t,x,z) \end{pmatrix}$$
$$= -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\begin{pmatrix} \Psi_+(t,x,z) \\ \Psi_-(t,x,z) \end{pmatrix} + \frac{\hbar}{2}\gamma\alpha x\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \Psi_+(t,x,z) \\ \Psi_-(t,x,z) \end{pmatrix} - \frac{\hbar}{2}\gamma(B_0 + \alpha z)\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \Psi_+(t,x,z) \\ \Psi_-(t,x,z) \end{pmatrix},$$

となるので、整理して

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi_+(t,x,z) = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\Psi_+(t,x,z) + \frac{\hbar}{2}\gamma\alpha x\Psi_-(t,x,z) - \frac{\hbar}{2}\gamma(B_0 + \alpha z)\Psi_+(t,x,z),$$
$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi_-(t,x,z) = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\Psi_-(t,x,z) + \frac{\hbar}{2}\gamma\alpha x\Psi_+(t,x,z) + \frac{\hbar}{2}\gamma(B_0 + \alpha z)\Psi_-(t,x,z),$$

となる。

(2)　与えられた表式を (1) の結果に代入し、

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\tilde{\Psi}_+(t,x,z) = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\tilde{\Psi}_+(t,x,z) + \frac{\hbar}{2}\gamma\alpha x e^{-i\gamma B_0 t}\tilde{\Psi}_-(t,x,z) - \frac{\hbar}{2}\gamma\alpha z\tilde{\Psi}_+(t,x,z),$$
$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\tilde{\Psi}_-(t,x,z) = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\tilde{\Psi}_-(t,x,z) + \frac{\hbar}{2}\gamma\alpha x e^{i\gamma B_0 t}\tilde{\Psi}_+(t,x,z) + \frac{\hbar}{2}\gamma\alpha z\tilde{\Psi}_-(t,x,z),$$

となる。

(3)　(2) の結果から振動部分を除くと

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\tilde{\Psi}_+(t,x,z) = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\tilde{\Psi}_+(t,x,z) - \frac{\hbar}{2}\gamma\alpha z\tilde{\Psi}_+(t,x,z),$$
$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\tilde{\Psi}_-(t,x,z) = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\tilde{\Psi}_-(t,x,z) + \frac{\hbar}{2}\gamma\alpha z\tilde{\Psi}_-(t,x,z),$$

となるが、これはポテンシャル

$$V_\pm(x,z) = \mp\frac{\hbar}{2}\gamma\alpha z,$$

の下で運動する粒子の Schrödinger 方程式である。よって、例えば $\gamma > 0,\ \alpha > 0$ の場合、$\Psi_\pm(t,x,z)$ の波束はそれぞれ $\pm z$ 方向へ分離する。

[問 3]　スピン角運動量の合成について、交換する演算子の組を理解しよう。以下のように、粒子 1, 粒子 2 に対応した 2 種類のスピン演算子を導入する

$$\text{粒子 1 : } \hat{\mathbf{S}}_1 = \begin{pmatrix} \hat{S}_{1x} \\ \hat{S}_{1y} \\ \hat{S}_{1z} \end{pmatrix}, \qquad \text{粒子 2 : } \hat{\mathbf{S}}_2 = \begin{pmatrix} \hat{S}_{2x} \\ \hat{S}_{2y} \\ \hat{S}_{2z} \end{pmatrix}.$$

粒子 1 と粒子 2 のスピン演算子は $[\hat{S}_{1i}, \hat{S}_{2j}] = 0\ (i,j = x,y,z)$ および $[\hat{S}_{1i}, \hat{S}_{1j}] = i\hbar\epsilon_{ijk}\hat{S}_{1k},\ [\hat{S}_{2i}, \hat{S}_{2j}] = i\hbar\epsilon_{ijk}\hat{S}_{2k}\ (i,j,k = x,y,z)$ を満たす。また、それぞれについて昇降演算子は $\hat{S}_{1\pm} := \hat{S}_{1x} \pm i\hat{S}_{1y},\ \hat{S}_{2\pm} = \hat{S}_{2x} \pm i\hat{S}_{2y}$ で定義される。このとき、粒子 1, 2 を合わせたスピン演算子

$$\hat{\mathbf{S}} = \begin{pmatrix} \hat{S}_x \\ \hat{S}_y \\ \hat{S}_z \end{pmatrix} := \begin{pmatrix} \hat{S}_{1x}+\hat{S}_{2x} \\ \hat{S}_{1y}+\hat{S}_{2y} \\ \hat{S}_{1z}+\hat{S}_{2z} \end{pmatrix} = \hat{\mathbf{S}}_1 + \hat{\mathbf{S}}_2,$$

について、以下の問いに答えよ。

(1)　全スピン角運動量の二乗が

$$\hat{\mathbf{S}}^2 = \hat{\mathbf{S}}_1^2 + \hat{\mathbf{S}}_2^2 + \hat{S}_{1+}\hat{S}_{2-} + \hat{S}_{1-}\hat{S}_{2+} + 2\hat{S}_{1z}\hat{S}_{2z},$$

と書けることを示せ。

(2)　$\hat{\mathbf{S}}^2$ と $\hat{\mathbf{S}}_1^2$ および $\hat{\mathbf{S}}^2$ と $\hat{\mathbf{S}}_2^2$ が交換することを示せ。

(3)　$\hat{\mathbf{S}}^2$ と $\hat{S}_{1z}$ および $\hat{\mathbf{S}}^2$ と $\hat{S}_{2z}$ が交換しないことを示せ。

[解 3]

(1) 定義を代入し、

$$
\begin{aligned}
\hat{\mathbf{S}}^2 &= (\hat{\mathbf{S}}_1 + \hat{\mathbf{S}}_2)^2 \\
&\overset{[\hat{S}_{1i}, \hat{S}_{2j}]=0}{=} \hat{\mathbf{S}}_1^2 + \hat{\mathbf{S}}_2^2 + 2\hat{\mathbf{S}}_1 \cdot \hat{\mathbf{S}}_2 \\
&= \hat{\mathbf{S}}_1^2 + \hat{\mathbf{S}}_2^2 + 2(\hat{S}_{1x}\hat{S}_{2x} + \hat{S}_{1y}\hat{S}_{2y} + \hat{S}_{1z}\hat{S}_{2z}) \\
&= \hat{\mathbf{S}}_1^2 + \hat{\mathbf{S}}_2^2 + \hat{S}_{1+}\hat{S}_{2-} + \hat{S}_{1-}\hat{S}_{2+} + 2\hat{S}_{1z}\hat{S}_{2z},
\end{aligned}
$$

と示される。

(2) $\hat{\mathbf{S}}^2$ と $\hat{\mathbf{S}}_1^2$ について、

$$
\begin{aligned}
[\hat{\mathbf{S}}^2, \hat{\mathbf{S}}_1^2] &= [\hat{\mathbf{S}}_1^2 + \hat{\mathbf{S}}_2^2 + 2\hat{\mathbf{S}}_1 \cdot \hat{\mathbf{S}}_2, \hat{\mathbf{S}}_1^2] \\
&\overset{[\hat{\mathbf{S}}_1^2, \hat{\mathbf{S}}_1^2]=0,\ [\hat{\mathbf{S}}_2^2, \hat{\mathbf{S}}_1^2]=0}{=} 2[\hat{\mathbf{S}}_1 \cdot \hat{\mathbf{S}}_2, \hat{\mathbf{S}}_1^2] \\
&= 2[\hat{S}_{1x}\hat{S}_{2x} + \hat{S}_{1y}\hat{S}_{2y} + \hat{S}_{1z}\hat{S}_{2z}, \hat{\mathbf{S}}_1^2] \\
&\overset{[\hat{S}_{2j}, \hat{\mathbf{S}}_1^2]=0}{=} 2\left([\hat{S}_{1x}, \hat{\mathbf{S}}_1^2]\hat{S}_{2x} + [\hat{S}_{1y}, \hat{\mathbf{S}}_1^2]\hat{S}_{2y} + [\hat{S}_{1z}, \hat{\mathbf{S}}_1^2]\hat{S}_{2z}\right) \\
&\overset{[\hat{S}_{1i}, \hat{\mathbf{S}}_1^2]=0}{=} 0,
\end{aligned}
$$

と示される。$\hat{\mathbf{S}}^2$ と $\hat{\mathbf{S}}_2^2$ についても同様である。

(3) $\hat{\mathbf{S}}^2$ と $\hat{S}_{1z}$ について、

$$
\begin{aligned}
[\hat{\mathbf{S}}^2, \hat{S}_{1z}] &= [\hat{\mathbf{S}}_1^2 + \hat{\mathbf{S}}_2^2 + 2\hat{\mathbf{S}}_1 \cdot \hat{\mathbf{S}}_2, \hat{S}_{1z}] \\
&\overset{[\hat{\mathbf{S}}_1^2, \hat{S}_{1z}]=0,\ [\hat{\mathbf{S}}_2^2, \hat{S}_{1z}]=0}{=} 2[\hat{\mathbf{S}}_1 \cdot \hat{\mathbf{S}}_2, \hat{S}_{1z}] \\
&= 2[\hat{S}_{1x}\hat{S}_{2x} + \hat{S}_{1y}\hat{S}_{2y} + \hat{S}_{1z}\hat{S}_{2z}, \hat{S}_{1z}] \\
&= 2\left([\hat{S}_{1x}, \hat{S}_{1z}]\hat{S}_{2x} + [\hat{S}_{1y}, \hat{S}_{1z}]\hat{S}_{2y}\right) \\
&= 2i\hbar\left(-\hat{S}_{1y}\hat{S}_{2x} + \hat{S}_{1x}\hat{S}_{2y}\right) \\
&\neq 0,
\end{aligned}
$$

と示される。$\hat{\mathbf{S}}^2$ と $\hat{S}_{2z}$ についても同様である。