

# 量子力学第2:第3回演習(2002/6)

担当: 星 健夫 (理工工学科)

## 1

電磁場中の電子を考える。電子の質量を  $m$ 、電荷量を  $-e$  ( $e > 0$ )、スカラーポテンシャルを  $\phi(\mathbf{r})$ 、ベクトルポテンシャルを  $\mathbf{A}$  と書くと、系の Hamiltonian は、次式で書ける。

$$H = \frac{1}{2m} (\mathbf{p} + e\mathbf{A})^2 - e\phi$$

(a) 数学公式  $\nabla \cdot (g\mathbf{F}) = (\nabla g) \cdot \mathbf{F} + g\nabla \cdot \mathbf{F}$  を示せ。ただし、 $\mathbf{F}$  は任意のベクトル関数で、 $g$  は任意のスカラー関数。

(b) 確率密度を  $\rho \equiv |\psi|^2$  とすると、確率密度の流れ (current)  $\mathbf{j}$  は、次式で定義される。

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div} \mathbf{j} = 0$$

この意味を説明せよ。なお、 $-e\rho$ 、 $-e\mathbf{j}$  は、電荷密度分布と電流密度分布にそれぞれ相当する。

(c) (b) で Schrödinger 方程式 ( $i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = H\psi$ ) を適用することにより、次式が得られることを示せ。

$$\begin{aligned} \mathbf{j} &= \frac{\hbar}{2mi} (\psi^* \text{grad} \psi - \psi \text{grad} \psi^*) + \frac{e}{m} \mathbf{A} |\psi|^2 \\ &= \frac{1}{m} \{ \hbar \nabla \Theta + e\mathbf{A} \} |\psi|^2 \end{aligned}$$

最後の式変型では、 $\psi \equiv |\psi|e^{i\Theta}$  とおいた。

(d) 上式で、電磁場のゲージ変換

$$\begin{aligned} \mathbf{A} &\rightarrow \mathbf{A}' \equiv \mathbf{A} - \text{grad} \chi \\ \phi &\rightarrow \phi' \equiv \phi + \frac{\partial \chi}{\partial t} \end{aligned}$$

を行うと、どうなるか。ただし、 $\chi$  は任意のスカラー関数。得られた結果は、もっともか。

[コメント] 量子力学において波動関数は複素数であり、振幅  $|\psi|$  と位相  $\Theta$  の2つの自由度をもつ。この問題から、両者により電荷分布と電流分布とが与えられることが分かる。

(e) 古典粒子での電流の表式を考え、上記との対応を考えよ。

## 2

球対称ポテンシャル系に対し、スピン軌道相互作用 (spin-orbit coupling) をいれて考える。対応するハミルトニアンは、次式で与えられる。

$$H = H_0 + H_{\text{SO}}, \quad H_0 = \frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(r), \quad H_{\text{SO}} = \xi(r) \mathbf{l} \cdot \mathbf{s}$$

合成角運動量を  $\mathbf{j} \equiv \mathbf{l} + \mathbf{s}$  と定義する。 $X = l^2, l_x, l_y, l_z, s^2, s_x, s_y, s_z, j^2, j_x, j_y, j_z$  のそれぞれの場合について、交換関係  $[H, X]$  を計算せよ。また、これから得られる物理的結論はなにか、考えよ。

## 3 (自由課題)

1次元ポテンシャル系に対する Schrödinger 方程式は、

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = H\psi$$
$$H \equiv \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x)$$

で与えられる。JAVA などを持ちいて、これを数值的に解くプログラムを作成せよ。波動関数  $\psi(x, t)$  の他、確率密度  $\rho(x, t)$ , 確率密度の流れ  $j(x, t)$  なども可視化せよ。

(注) 細かい条件は、自分で設定せよ。複数の人で取り組んでも良い。提出は、ソースコード、実行ファイル、原理・考察などのレポート、の3点。昨年度の学生が製作したコードを元にしても構わない。

(注) 希望があれば、上記以外の課題でも構わない。ただし、(a) 量子力学に関連したもの、(b) データが可視化されているもの、でなければならない。