科目名	学年	番号	学籍番号	氏名
量子力学I　第12回	2			

再来週は試験なので，このプリントは提出しなくてよい。　　**授業時間外の学習時間：＿＿時間＿＿分**

[1] 「詳解　量子化学の基礎」の10章（135頁〜146頁）を読んで理解せよ。

[2] 角運動量の二乗の演算子 $\hat{\boldsymbol{\ell}}^2$ は，極座標において以下のように表される。

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

一方，3次元空間中を半径 r で回転する粒子に関するSchödingerの波動方程式は，以下のように表される。

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

ただし，$U(r)=0$ とした。このSchödinger方程式の解 $Y(\theta,\phi)$ は［　(a)　］関数とよばれる。また，エネルギー固有値 E は $E=$［　(b) 文字式　］と表される。上式の両辺を $2I$ 倍すると，左辺は $\hat{\boldsymbol{\ell}}^2 Y$ に等しい。

$$\underbrace{-\hbar^2\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial Y}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2 Y}{\partial\phi^2}\right]}_{=\hat{\boldsymbol{\ell}}^2 Y}=2IEY$$

$$\hat{\boldsymbol{\ell}}^2 Y = 2IEY \qquad (1)$$

すなわち，$\hat{\boldsymbol{\ell}}^2$ の固有値は，

$$2IE = 2I\times \boxed{\text{(b) 再出}}$$
$$= \ell(\ell+1)\hbar^2$$

となる。また，角運動量の自乗の演算子 $\hat{\boldsymbol{\ell}}^2$ は $R(r)$ に作用しないから，(1)式の両辺に $R(r)$ をかけると，

$$\hat{\boldsymbol{\ell}}^2 RY = \ell(\ell+1)\hbar^2 RY$$
$$\hat{\boldsymbol{\ell}}^2 \Psi = \ell(\ell+1)\hbar^2 \Psi$$

ただし, $\ell = 0,1,2,\cdots,n-1$

と変形できる。Ψ は水素原子中の電子の波動関数にほかならないから，水素原子中の電子の角運動量の自乗の固有値が［　(c) すぐ前に既出　］であることがわかった。以上より，Ψ は $\hat{\boldsymbol{\ell}}^2$ とハミルトニアンの共通の固有関数となることがわかった。これは，状態 Ψ において，角運動量の自乗とエネルギーが同時に［　(d)　］をとることを表している。

[3] 次に，角運動量の z 成分の固有値について考える。角運動量の z 成分の演算子は $\hat{\ell}_z =$［　(e) 文字式　］であり，水素原子の基底状態における波動関数の ϕ 依存性は $\Phi(\phi)=e^{im\phi}/\sqrt{2\pi}$ であるから，以下の結果を得る。

$$\hat{\ell}_z\Psi = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\phi}\Psi = -i\hbar(im)\Psi$$
$$= m\hbar\Psi$$

ただし, $m=-\ell,-\ell+1,\cdots,\ell-1,\ell$

すなわち，角運動量の z 成分の固有値は［　(f) すぐ前に既出　］である。

[4] 角運動量の二乗，z 成分についての固有方程式をまとめて書いておく。

$$\hat{\boldsymbol{\ell}}^2\Psi = \boxed{\text{(g) 既出}}\,\Psi$$
$$\hat{\ell}_z\Psi = \boxed{\text{(h) 既出}}\,\Psi$$

[5] スピン角運動量演算子 $\hat{\boldsymbol{s}}$ の自乗 $\hat{\boldsymbol{s}}^2$ と，スピン角運動量の z 成分の演算子 $\hat{s}_z$ には共通な固有関数 Γ があり，以下のような関係式が成り立つ。

$$\hat{\boldsymbol{s}}^2\Gamma = \boxed{\text{(i) 文字式}}\,\Gamma$$
$$\hat{s}_z\Gamma = \boxed{\text{(j) 文字式}}\,\Gamma$$

ただし，スピン量子数を s，スピン磁気量子数を m_s で表す。さらに，一般的な角運動量の性質から類推すると，スピン磁気量子数 m_s は $-s,-s+1,\cdots,s-1,s$ の［　(k) 文字式　］通りになると考えられる。そして［　(ℓ) 人名　］の実験により，これが2通りにしかならないことが示された。よって，［　(k) 再出　］$=2$ から $s=1/2$ が得られ，$m_s=\pm1/2$ であることが結論される。「軌道」角運動量では ℓ は整数しかとらなかったが,「スピン」角運動量では s が $1/2$ という［　(m)　］をとる。

[6] 2 つの電子は同じ 1 粒子状態を占めることができない。すなわち，1 つの軌道には α スピンおよび $\boxed{\text{(n) ギリシャ文字}}$ スピンの電子をそれぞれ 1 個収容可能であるが，同じスピンの電子を $\boxed{\text{(o) 数}}$ 個以上収容することはできない。これを，$\boxed{\text{(p) 人名}}$ の排他律という。

[7] ミクロな系では，2 つの同種粒子は本質的に区別できない。これを $\boxed{\text{(q)}}$ という。粒子が同等ということは，2 つの粒子からなる系の波動関数を $\Psi(\tau_1, \tau_2)$ としたとき，これと，粒子を交換した波動関数 $\boxed{\text{(r) 文字式}}$ を区別できない。すなわち，

$$\Psi(\tau_1, \tau_2) \quad = \quad e^{i\theta} \boxed{\text{(r) 再出}}$$

が成り立つ。ここで，$e^{i\theta}$ は位相因子である。これと逆の式も同様の理由で成り立つ。

$$\Psi(\tau_2, \tau_1) \quad = \quad e^{i\theta}\Psi(\tau_1, \tau_2)$$

この 2 式から，ただちに $e^{i\theta} = \boxed{\text{(s) 数値}}$ を得る。これを上式に代入すると次式を得る。

$$\Psi(\tau_1, \tau_2) \quad = \quad \boxed{\text{(s) 再出}}\,\Psi(\tau_2, \tau_1)$$

すなわち，粒子を交換することにより，波動関数の符号が変わる場合と変わらない場合がある。粒子を交換することにより，波動関数の符号が変わらないことを「波動関数が粒子の交換に対して $\boxed{\text{(t)}}$ である」と言い，符号が変わることを「波動関数が粒子の交換に対して $\boxed{\text{(u)}}$ である」と言う。粒子の交換に対して波動関数が $\boxed{\text{(u) 再出}}$ である粒子を Fermi 粒子，もしくは $\boxed{\text{(v)}}$ という。これの仲間には電子，陽子，中性子があり，半整数のスピン量子数を持つ。これとは別に，0 もしくは整数のスピン量子数を持つ粒子で，粒子の交換に対して波動関数が $\boxed{\text{(t) 再出}}$ であるものを Bose 粒子もしくは $\boxed{\text{(w)}}$ とよぶ。

解答

---

[1] なし

[2] (a)：球面調和 (b)：$\ell(\ell+1)\dfrac{\hbar^2}{2I}$ (c)：$\ell(\ell+1)\hbar^2$
(d)：確定値

[3] (e)：$-i\hbar\dfrac{\partial}{\partial\phi}$ (f)：$m\hbar$

[4] (g)：$\ell(\ell+1)\hbar^2$ (h)：$m\hbar$

[5] (i)：$s(s+1)\hbar^2$ (j)：$m_s\hbar$ (k)：$2s+1$
(ℓ)：Stern−Gerlach（シュテルン – ゲルラッハ）
(m)：半整数

[6] (n)：β (o)：2 (p)：Pauli（パウリ）

[7] (q)：粒子の同等性 (r)：$\Psi(\tau_2, \tau_1)$ (s)：±1
(t)：対称 (u)：反対称
(v)：Fermion（フェルミオン）
(w)：Boson（ボゾン）
