—-量子力学第 2　　2002 July 16 試験（9:00-12:00）

等方的 3 次元調和振動子のハミルトニアンは

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m}(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}) + \frac{1}{2}m\omega_0^2(x^2 + y^2 + z^2)$$

である。等方的 3 次元調和振動子と角運動量について考察する。スピンは考えない。以下の問に答えよ。

（途中の問題、例えば問題 1 に答えられなくても簡単に放棄せず先に進みなさい。）

問題 1 以下の手順に従って、摂動の 1 次の波動関数の公式を構成せよ。

ハミルトニアンを $H = H_0 + \lambda H'$ とする。H_0 は無摂動ハミルトニアン、H' は摂動ハミルトニアンで λ は最後に $\lambda \to 1$ とする摂動のパラメタである。ハミルトニアン H の固有状態の波動関数 ϕ_n および固有エネルギー E_n を

$$\begin{aligned} \phi_n &= \phi_n^{(0)} + \lambda \sum_m c_{nm}^{(1)} \phi_m^{(0)} + \cdots\cdots \\ E_n &= E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \cdots\cdots \end{aligned}$$

と書こう。ただし、$H\phi_n = E_n\phi_n$, $H_0\phi_n^{(0)} = E_n^{(0)}\phi_n^{(0)}$ である。ここで $c_{nn}^{(1)} = 0$ としても一般性は失わないので、$c_{nn}^{(1)} = 0$ とする。シュレディンガ　方程式に波動関数およびエネルギーの λ による展開式を代入し、λ に関して 1 次の式を求めることにより $c_{nm}^{(1)}$ を決定せよ。

問題 2 3 次元調和振動子は x, y, z 方向成分の 1 次元調和振動子の組合せと考えることもできるが、一方で極座標を用いてあらわす方が便利なことも多い。3 次元調和振動子の固有状態をエネルギーの低い方から 4 個とり、その固有エネルギーと 1 次元調和振動子の 3 個の量子数 (n_x, n_y, n_z) を定めよ。さらにそれらの状態について、極座標を用いた波動関数を書き下し, 角運動量量子数（方位量子数、磁気量子数）を決めよ。ただし 1 次元調和振動子のエネルギーは $E_n = \hbar\omega_0(n + \frac{1}{2})$ であること、その他波動関数の性質など既知とする。（末尾参考２　４を参照）

問題 3 基底状態にある 3 次元調和振動子に z 方向の一様電場をかける。このときの摂動ハミルトニアンは (電荷は e) $H' = -e\mathcal{E}z$ である。このときの分極 $p_z = e\langle\phi_0|z|\phi_0\rangle$ を、極座標で表した波動関数を用いて計算せよ。またこれから分極率 ($p_z = \gamma\mathcal{E}$ と書いたときの係数 γ) を求めよ。

ただし積分公式

$$\int_0^\infty \exp(-\alpha^2 r^2) r^{2n} \mathrm{d}r = \frac{(2n-1)!!}{2^{n+1}} \frac{\sqrt{\pi}}{\alpha^{2n+1}}$$

を用いてよい。

問題 4 3 次元調和振動子を 1 次元調和振動子の積と考え、1 次元調和振動子に対する 1 次摂動として上の問題を解き、分極率を計算せよ。ただし 1 次元調和振動子については x に対する（H_0 の固有状態に関する）行列要素は参考 4 を用いよ。

問題 5 前問の波動関数を正確に求め、分極率を計算せよ。

参考 1 ラプラシアン Δ を極座標（$x = r\sin\theta\cos\phi$, $y = r\sin\theta\sin\phi$,$z = r\cos\theta$) であらわせば

$$\Delta = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}(r^2\frac{\partial}{\partial r}) - \frac{\hat{\ell}^2}{r^2\hbar^2}, \qquad \hat{\ell}^2 = -\hbar^2[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}] \ .$$

参考 2 1 次元調和振動子 (ハミルトニアン H が $H = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}mw_0^2x^2$) の波動関数は
$\psi_n(x) = N_nH_n(\alpha x)\exp(-\alpha^2x^2/2)$, ただし $\alpha = \sqrt{m\omega_0/\hbar}$, $N_n = \sqrt{\alpha/(\sqrt{\pi}2^nn!)}$.

$$H_0(x) = 1, \quad H_1(x) = 2x, \quad H_2(x) = 4x^2 - 2, \quad H_3(x) = 8x^3 - 12x, \cdots\cdots$$

参考 3 球関数について

$(\ell = 0 : s - wave)$ $\qquad Y_{00} = 1/\sqrt{4\pi}$

$(\ell = 1 : p - wave)$

$$\begin{aligned} Y_{11} &= -\sqrt{\frac{3}{8\pi}}(x+iy)/r = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta e^{i\phi}, \\ Y_{10} &= \sqrt{\frac{3}{4\pi}}z/r = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta, \\ Y_{1-1} &= \sqrt{\frac{3}{8\pi}}(x-iy)/r = \sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta e^{-i\phi} \end{aligned}$$

$(\ell = 2 : d - wave)$

$$\begin{aligned} Y_{22} &= \frac{\sqrt{15}}{4\sqrt{2\pi}}\sin^2\theta e^{2i\phi}, \\ Y_{21} &= -\frac{\sqrt{15}}{2\sqrt{2\pi}}\sin\theta\cos\theta e^{i\phi}, \\ Y_{20} &= \frac{\sqrt{5}}{2\sqrt{4\pi}}(3\cos^2\theta - 1), \\ Y_{2-1} &= \frac{\sqrt{15}}{2\sqrt{2\pi}}\sin\theta\cos\theta e^{-i\phi}, \\ Y_{2-2} &= \frac{\sqrt{15}}{4\sqrt{2\pi}}\sin^2\theta e^{-2i\phi} \end{aligned}$$

参考 4 1 次元振動子 (ハミルトニアン $H = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}mw_0^2x^2$) の x に対する行列要素は

$$\begin{aligned} (x)_{n,n-1} &= (x)_{n-1,n} = \sqrt{\frac{\hbar n}{2mw_0}}, \\ (x)_{n,m} &= 0 \quad (m \neq n \pm 1) \end{aligned}$$