—-量子力学第 2　　１９９７．９．１６ 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

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

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 ラプラシアンΔを極座標（$x = r\sin\theta\cos\phi,\ y = r\sin\theta\sin\phi, z = r\cos\theta$）を用いて、

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

となることを示せ。

問題 2 角運動量演算子 $\ell,\ \ell_z$ について、交換関係 $[\ell^2, H_0]$, $[\ell_z, H_0]$, を計算し、その意味を説明せよ。（$[\ell^2, \ell_z]$ も考慮せよ。）

問題 3 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。1 次元調和振動子のエネルギーは $E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})$ 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１－３を参照）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 10 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、角運動量量子数（方位量子数、磁気量子数）を決めよ。

問題 4

4-1 今考えている 3 次元調和振動子を z 方向にかけた静磁場の中におく。調和振動子の電荷を e とするとハミルトニアンは $H = \frac{1}{2m}(\mathbf{p} - e\mathbf{A})^2 + \frac{1}{2}m\omega^2(x^2 + y^2 + z^2)$ となる。ただし $\mathbf{A}$ はベクトルポテンシャル、磁場は $\mathbf{B} = (0, 0, B)$ で $\mathbf{A} = \frac{1}{2}\mathbf{B} \times \mathbf{r}$ と選ぶ。これを変形してゼーマン項が角運動量演算子で表される形に書き直せ。

4-2 $[H, \ell_z]$, $[H, \ell^2]$ を計算せよ。

4-3 ゼーマン効果を無視して反磁性項のみ考慮した場合、各エネルギー準位はどのように変化するか。具体的に固有状態のエネルギーと波動関数（1 次元調和振動子波動関数を用いて）を示せ。

4-4 さらにゼーマン効果を考慮した時、どのような変更を受けるか。固有状態のエネルギーおよび波動関数を具体的に示せ。

問題 5

5-1 元に戻って今考えている 3 次元調和振動子を z 方向にかけた静電場 $\mathcal{E}$ の中におく。調和振動子の電荷を e とするとハミルトニアンは $H = \frac{1}{2m}\mathbf{p}^2 - e\mathcal{E}z + \frac{1}{2}m\omega^2(x^2 + y^2 + z^2)$ となる。このとき電場について 2 次の摂動の範囲で問題３で考えた 10 個の状態について、エネルギーを定めよ。

5-2 前問を正確に解くことを試みよ。

5-3 時間 $t<0$ で外場がかかっていない 3 次元調和振動子が基底状態にある。時間 $t\geq 0$ に z方向に定電場 $\mathcal{E}$をかける（上のハミルトニアン)。以後の双極子モーメント $e\langle\mathbf{r}\rangle$ の時間変化を調べよ。ただし 1 次元調和振動子の基底状態波動関数 $\psi_0(x)$ について、波動関数の中心を a だけずらした $\psi_0(x-a)$ は $\psi_n(x)$ により

$$\psi_0(x-a)=\sum_{n=0}^{\infty}A_n\psi_n(x), \quad A_n=(\alpha a)^n\frac{\exp\{-\frac{1}{4}(\alpha a)^2\}}{(2^n n!)^{1/2}}$$

と書けることを用いてよい。

参考 1 1 次元調和振動子の波動関数は$\psi_n(x)=N_nH_n(\alpha x)\exp(-\alpha^2x^2/2)$, 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 2 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 3 1 次元振動子のハミルトニアンが

$$H=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+\frac{1}{2}mw_0^2x^2$$

と与えられている場合、x に対する行列要素は

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