—-**量子力学第** 2　　2001 Jan.12　Feb.1 **試験**

以下の設問に答えよ。

問題 1 球対称ポテンシャル中に置かれた束縛状態にある電子の波動関数を $f(r)Y_{lm}(\theta\phi)$ と書こう。ここで$\vec{r}$はポテンシャルの中心を原点とした電子の座標、r,θ, ϕはそれを極座標で表したものであり、$Y_{lm}(\theta,\phi)$ は球関数でその規格化条件は

$$\int_0^{\pi}\sin\theta \mathrm{d}\theta\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\phi|Y_{lm}(\hat{\vec{r}})|^2=1 \tag{1}$$

と与えられる。このとき動径波動関数 $f(r)$ の規格化条件はどのように書けるか。

問題 2 球対称ポテンシャル中に置かれた方位量子数 $l=1$ の状態にある電子を考えよう。（これ以外の方位量子数を持つ状態は考えないでよい。）これに次の摂動ハミルトニアンで表される異方的なポテンシャルが働いている。

$$H'=Az^2 \quad (A>0) \tag{2}$$

スピン角運動量を無視した場合、方位量子数 $l=1$ の状態はどのように分裂するか。ただし $a=A\int_0^\infty \mathrm{d}rr^4f(r)^2$ と置け。

問題 3 スピン軌道相互作用を考慮すると、方位量子数 $l=1$ の状態はどのように変化するか。スピン軌道相互作用を表すハミルトニアンを

$$H_{s-o}=\xi(r)\vec{l}\cdot\vec{s} \tag{3}$$

と書く。エネルギー固有状態の波動関数とエネルギー固有値を示し、良い量子数は何か述べよ。ただし、$b=\int_0^\infty \mathrm{d}rr^2\xi(r)f(r)^2$ と置け。

問題 4 問題 2 の異方的ポテンシャルとスピン軌道相互作用がともに無視できないとき、電子の摂動ハミルトニアンは

$$H'=Az^2+\xi(r)\vec{l}\cdot\vec{s} \tag{4}$$

となる。この場合の $l=1$ の状態のエネルギー固有値を求めよ。

[参考] 球関数について

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

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

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

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

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