物理学演習 B [発展コース] 問題 解答例

担当 栗本 (krmt@sci.u-toyama.ac.jp)

近似法

1. ハミルトニアン $H = \dfrac{p^2}{2m} + \dfrac{1}{2}m\omega^2$ で表される 1 次元調和振動子の基底状態の波動関数 ψ_0 は以下で与えられる．
$$\psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{1/4} e^{-m\omega x^2/(2\hbar)}$$
これを用いて 1 次の摂動を計算すると
$$\begin{aligned}
\Delta E &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi_0^* \hat{H}_1 \psi_0 dx = \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} cx^4 e^{-m\omega x^2/\hbar} dx \\
&= c\left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{1/2} \frac{\hbar^2}{\omega^2}\frac{\partial^2}{\partial m^2}\left(\int_{-\infty}^{\infty} e^{-m\omega x^2/\hbar} dx\right) = c\left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{1/2} \frac{\hbar^2}{\omega^2}\frac{\partial^2}{\partial m^2}\sqrt{\frac{\hbar\pi}{m\omega}} \\
&= c\frac{m^{1/2}\hbar^2}{\omega^2}\frac{3}{4}m^{-5/2} = \frac{3c\hbar^2}{4m^2\omega^2}
\end{aligned}$$

2. 2 次の摂動によるエネルギーの変化は以下で与えられる．
$$E_n^{(2)} = \sum_{k\neq n} \frac{\langle n|\hat{H}_1|k\rangle\langle k|\hat{H}_1|n\rangle}{\epsilon_n - \epsilon_k}$$
ここで ϵ_n は摂動が無い場合のエネルギー固有状態 $|n\rangle$ の固有値である．基底状態を考えて $n = 0$ と置くと，$\epsilon_0 - \epsilon_{k\neq 0} < 0$ より
$$E_0^{(2)} = \sum_{k\neq 0} \frac{\langle 0|\hat{H}_1|k\rangle\langle k|\hat{H}_1|0\rangle}{\epsilon_0 - \epsilon_k} = \sum_{k\neq 0} \frac{|\langle 0|\hat{H}_1|k\rangle|^2}{\epsilon_0 - \epsilon_k} < 0$$
よって，2 次の摂動の効果は負である．題意より 1 次の摂動は 0 であるので，このとき 2 次の摂動の効果によって基底状態のエネルギーは無摂動のときよりも低くなる．

3. 2 つの独立な固有状態を $|1\rangle, |2\rangle$ と記す．適当な一次結合を取り直すことにより，これらは規格直交化することができるので，以下ではそうされているものとする．ハミルトニアン H を摂動の無い部分 H_0 と摂動の部分 H_1 に分ける，$H = H_0 + H_1$．題意より
$$H_0|1\rangle = E_0|1\rangle \quad , \quad H_0|2\rangle = E_0|2\rangle \quad (E_0 \text{ は } H_0 \text{ のエネルギー固有値})$$
が成立している．ハミルトニアンの行列表示を求めると
$$\begin{aligned}
\begin{pmatrix} \langle 1|H|1\rangle & \langle 1|H|2\rangle \\ \langle 2|H|1\rangle & \langle 2|H|2\rangle \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} \langle 1|H_0|1\rangle & \langle 1|H_0|2\rangle \\ \langle 2|H_0|1\rangle & \langle 2|H_0|2\rangle \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \langle 1|H_1|1\rangle & \langle 1|H_1|2\rangle \\ \langle 2|H_1|1\rangle & \langle 2|H_1|2\rangle \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} E_0 & 0 \\ 0 & E_0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \langle 1|H_1|1\rangle & \langle 1|H_1|2\rangle \\ \langle 2|H_1|1\rangle & \langle 2|H_1|2\rangle \end{pmatrix}
\end{aligned}$$
右辺第 2 項の行列の固有値と固有ベクトルを求めれば摂動の効果を得ることができる．

4. 電場の方向を z 軸の正の方向にとり，その大きさを E と記す．電子の電荷を $-e$ とすると，電場の存在によって，電子には
$$V = eEz$$

のポテンシャルが加わることになる．これを摂動として取り扱う．主量子数 $n=2$ の電子の状態を軌道角運動量量子数 ℓ と磁気量子数 m で区別すると，

$$|\ell, m\rangle = |1,1\rangle\ ,\ |1,0\rangle\ ,\ |1,-1\rangle\ ,\ |0,0\rangle$$

の 4 つの状態が存在する．摂動 V を行列表示すると

$$\begin{pmatrix} \langle 1,1|V|1,1\rangle & \langle 1,1|V|1,-1\rangle & \langle 1,1|V|1,0\rangle & \langle 1,1|V|0,0\rangle \\ \langle 1,-1|V|1,-1\rangle & \langle 1,1|V|1,-1\rangle & \langle 1,-1|V|1,0\rangle & \langle 1,-1|V|0,0\rangle \\ \langle 1,0|V|1,0\rangle & \langle 1,1|V|1,-1\rangle & \langle 1,0|V|1,0\rangle & \langle 1,0|V|0,0\rangle \\ \langle 0,0|V|0,0\rangle & \langle 1,1|V|1,-1\rangle & \langle 0,0|V|1,0\rangle & \langle 0,0|V|0,0\rangle \end{pmatrix}$$

球座標を用いて $V = eEz = eEr\cos\theta$ と表し，この行列要素を計算すると，$\langle 1,0|V|0,0\rangle = (\langle 0,0|V|1,0\rangle)^*$ 以外は 0 になる．($\langle 1,0|V|0,0\rangle$ も実数となる．) その値を A ($A = 3eE\dfrac{\hbar^2}{mke^2}$) とすれば

$$\begin{pmatrix} 0 & A \\ A & 0 \end{pmatrix}$$

の固有値 $\pm A$ だけ V の効果によってエネルギー準位が変動する．

5. ハミルトニアン H の固有関数の集合を $\{\phi_n\}$ と記す．$\{\phi_n\}$ は完全規格直交系にとれるので，規格化された任意の関数は ϕ_n で展開できて，$f = \sum_n c_n\phi_n$ と表すことができ，$\sum_n |c_n|^2 = 1$ である．このとき

$$\begin{aligned} \langle f|H|f\rangle &= \int (\sum_n c_n^*\phi_n^*) H (\sum_k c_k\phi_k) dV = \sum_{n,k} c_n^* c_k \int \phi_n^* H \phi_k dV \\ &= \sum_{n,k} c_n^* c_k \int \phi_n^* E_k \phi_k dV = \sum_{n,k} c_n^* c_k E_k \delta_{nk} = \sum_n |c_n|^2 E_n \geq \sum_n |c_n|^2 E_0 = E_0 \end{aligned}$$

等号が成立するのは $c_n = \delta_{n0}$ の場合で，このとき $f = \phi_0$ であり基底状態の波動関数に一致する．

6. まず規格化定数 N を求める

$$1 = |N|^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-2ax^2} dx = |N|^2 \sqrt{\frac{\pi}{2a}}$$

より $|N|^2 = \sqrt{\dfrac{2a}{\pi}}$．次に試行関数 ψ によるハミルトニアンの期待値を $E(a)$ と記すと

$$\begin{aligned} E(a) &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \right] \psi\, dx \\ &= |N|^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2} \left[\frac{a\hbar^2}{m} + \{-\frac{2a^2\hbar^2}{m} + \frac{1}{2}m\omega^2\} x^2 \right] e^{-ax^2}\, dx \quad \text{(10/16 演習問題 1 (a) 参照)} \\ &= |N|^2 \left[\frac{a\hbar^2}{m}\sqrt{\frac{\pi}{2a}} + \{-\frac{2a^2\hbar^2}{m} + \frac{1}{2}m\omega^2\} \left(-\frac{1}{2}\right) \frac{\partial}{\partial a}\sqrt{\frac{\pi}{2a}} \right] \\ &= |N|^2 \left[\frac{a\hbar^2}{m}\sqrt{\frac{\pi}{2a}} + \{-\frac{2a^2\hbar^2}{m} + \frac{1}{2}m\omega^2\} \left(-\frac{1}{2}\right) \sqrt{\frac{\pi}{2}} \left(-\frac{1}{2}\right) a^{-3/2} \right] \\ &= |N|^2 \left[\frac{\hbar^2}{m}\sqrt{\frac{\pi}{2}} a^{1/2} - \frac{\hbar^2}{2m}\sqrt{\frac{\pi}{2}} a^{1/2} + \frac{1}{8}m\omega^2 \sqrt{\frac{\pi}{2}} a^{-3/2} \right] \\ &= |N|^2 \frac{\hbar^2}{2m}\sqrt{\frac{\pi}{2}} \left[a^{1/2} + \frac{m^2\omega^2}{4\hbar^2} a^{-3/2} \right] \\ &= \frac{\hbar^2}{2m} \left[a + \frac{m^2\omega^2}{4\hbar^2} a^{-1} \right] \geq \frac{\hbar^2}{2m} 2\sqrt{a\frac{m^2\omega^2}{4\hbar^2} a^{-1}} = \frac{\hbar\omega}{2} \end{aligned}$$

ここで相加平均と相乗平均の関係を用いた．等号が成立して $E(a)$ が最小となるのは

$$a = \frac{m^2\omega^2}{4\hbar^2}a^{-1} \;\Rightarrow a = \frac{m\omega}{2\hbar}$$

のときである．

7. 規格化定数を求める

$$1 = \int |\psi|^2 dV = 4\pi|N|^2 \int_0^\infty e^{-2r/a} r^2 dr = \pi a^3 |N|^2$$

より，$|N|^2 = 1/(\pi a^3)$．H の期待値を $E(a)$ と記すと

$$\begin{aligned}
E(a) &= \int \psi^* H \psi \, dV = 4\pi|N|^2 \int_0^\infty e^{-r/a}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta - \frac{ke^2}{r}\right] e^{-r/a} r^2 \, dr \\
&= 4\pi \frac{1}{\pi a^3}\int_0^\infty e^{-r/a}\left[-\frac{\hbar^2}{2ma^2} + (\frac{\hbar^2}{ma} - ke^2)\frac{1}{r}\right] e^{-r/a} r^2 \, dr \quad \text{(10/16 小テスト参照)} \\
&= \frac{4}{a^3}\int_0^\infty \left[-\frac{\hbar^2}{2ma^2} r^2 + (\frac{\hbar^2}{ma} - ke^2) r\right] e^{-2r/a} \, dr \\
&= \frac{4}{a^3}\left[-\frac{\hbar^2}{2ma^2}\frac{a^3}{4} + (\frac{\hbar^2}{ma} - ke^2)\frac{a^2}{4}\right] = -\frac{\hbar^2}{2ma^2} + \frac{\hbar^2}{ma^2} - \frac{ke^2}{a} = \frac{\hbar^2}{2ma^2} - \frac{ke^2}{a} \\
&= \frac{\hbar^2}{2m}(\frac{1}{a} - \frac{mke^2}{\hbar^2})^2 - \frac{mk^2e^4}{2\hbar^2}
\end{aligned}$$

よって $a = \dfrac{\hbar^2}{mke^2}$ のときに $E(a)$ は最小になり，その値は $-\dfrac{mk^2e^4}{2\hbar^2}$ となる．

8.

(a) $x = r\sin\theta\cos\phi \;\; , \;\; y = r\sin\theta\sin\phi \;\; , \;\; z = r\cos\theta$

(b) $|\psi_{nlm}\rangle$ の m, ϕ に依存する部分は $e^{im\phi}$ で与えられることから

$$\begin{aligned}
\langle\psi_{n'l'm'}|x|\psi_{nlm}\rangle &\propto \int_0^{2\pi} e^{-im'\phi}\cos\phi \, e^{im\phi} d\phi = \int_0^{2\pi}\frac{1}{2}(e^{i\phi} + e^{-i\phi}) e^{i(m-m')\phi} d\phi \\
&= \frac{1}{2}\int_0^{2\pi}\left[e^{i(m-m'+1)\phi} + e^{i(m-m'-1)\phi}\right] d\phi = \pi(\delta_{m-m',-1} + \delta_{m-m',1})
\end{aligned}$$

よって $\langle\psi_{n'l'm'}|x|\psi_{nlm}\rangle$ が 0 にならないためには $m - m' = \pm 1$ が必要条件となる．

(c) (b) と同様にして

$$\begin{aligned}
\langle\psi_{n'l'm'}|y|\psi_{nlm}\rangle &\propto \int_0^{2\pi} e^{-im'\phi}\sin\phi \, e^{im\phi} d\phi = \int_0^{2\pi}\frac{1}{2i}(e^{i\phi} - e^{-i\phi}) e^{i(m-m')\phi} d\phi \\
&= \frac{1}{2i}\int_0^{2\pi}\left[e^{i(m-m'+1)\phi} - e^{i(m-m'-1)\phi}\right] d\phi = -i\pi(\delta_{m-m',-1} - \delta_{m-m',1})
\end{aligned}$$

よって $\langle\psi_{n'l'm'}|y|\psi_{nlm}\rangle$ が 0 にならないためには $m - m' = \pm 1$ が必要条件となる．

(d) 同様に

$$\begin{aligned}
\langle\psi_{n'l'm'}|z|\psi_{nlm}\rangle &\propto \int_0^{2\pi} e^{-im'\phi} e^{im\phi} d\phi = \int_0^{2\pi} e^{i(m-m')\phi} d\phi \\
&= 2\pi\delta_{mm'}
\end{aligned}$$

よって $\langle\psi_{n'l'm'}|z|\psi_{nlm}\rangle$ が 0 にならないためには $m = m'$ が必要条件となる．