量子力学 I 演習 問題 (第 11回)

樋口 さぶろお*

1997年7月7日

[11-1] 等方的な 2 次元調和振動子に対する非等方的摂動

2 次元の等方的調和振動子を考える [1, 問題 4-2[1]]:

$$H = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{p_y^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2(x^2+y^2). \tag{1}$$

1. 基底エネルギーを求めよ (1次元の調和振動子の解は知っているものとしてよい).
2. 摂動 $V = \lambda m\omega^2 xy$ $(\lambda \ll 1)$ がくわわったとき, 摂動論を用いて, 基底エネルギーを λ の 2 次で求めよ.
3. 摂動のくわわった系の基底エネルギーを厳密に求めよ.

Hint. 適当に座標軸をとり直して変数分離する.

[11-2] 等方的な 2 次元調和振動子に対する非等方的摂動 II

式 (1) において,

1. 低い方から3つのエネルギー固有状態を求めよ (1次元の調和振動子の解は知っているものとしてよい).
2. 摂動 $V = \lambda m\omega^2 xy$ $(\lambda \ll 1)$ がくわわったとき, 摂動論を用いて, 低い方から3つのエネルギー固有状態を λ の 0 次で, エネルギー固有値を λ の 1 次で求めよ.

*hig@rice.c.u-tokyo.ac.jp, URL: http://rice.c.u-tokyo.ac.jp/~hig/,
へや: 駒場 4 号館 413B(学生室の隣) 氷上研究室, でんわ: (03)54.54.67.35

3. 摂動のくわわった系のエネルギー固有値を厳密に求めよ.

[11-3]　1次の Stark 効果

水素原子中の電子の, 第一励起状態 $n = 2$ は4重に縮退している. すなわち, $(\ell, m) = (0,0), (1,0), (1,-1), (1,+1)$ である.

弱い電場を z 方向に加えた時のエネルギーの準位の変化を摂動論を用いて計算する.

1. 電場の大きさを E とするとき, Hamiltonian に加えるべき摂動項が

   $$V = eEz = eEr\cos\theta$$

   であることを納得せよ.

2. 縮退のある場合の摂動論を用いるので, 行列要素 $\langle \ell', m'|V|\ell, m\rangle$ を計算して対角化する. まず

   $$\langle \ell', m'|V|\ell, m\rangle \propto \delta_{m,m'}$$

   を示せ. ただし, 波動関数

   $$\psi_{n\ell m}(r,\theta,\phi) = R_{n\ell}(r)\Theta_{\ell m}(\theta)\Phi_m(\phi)$$

   は, 規格化を除いて,

   $$\begin{aligned}
   &\Phi_m(\phi) = (2\pi)^{-1/2}\exp[im\phi], \\
   &\Theta_{00}(\theta) = 2^{-1/2}, \quad \Theta_{10} = (3/2)^{1/2}\cos\theta, \quad \Theta_{1,\pm1}(\theta) = \mp(3/4)^{1/2}\sin\theta, \\
   &R_{20}(r) = \frac{1}{\sqrt{2}a_0^{3/2}}\left(1 - \frac{r}{2a_0}\right)\exp[-r/2a_0], \\
   &R_{21}(r) = \frac{1}{2\sqrt{6}a_0^{3/2}}\frac{r}{a_0}\exp[-r/2a_0].
   \end{aligned}$$

3. 摂動によるエネルギー準位の変化を求めよ.

[11-4]　変分法

ポテンシャル

$$(2)\qquad V = \begin{cases} 0, & \text{for } |x| < a \\ \infty, & \text{for } |x| > a \end{cases}$$

のもとで運動する 1 次元の量子力学的粒子を考える．

ポテンシャルの形から, 波動関数 $\Psi(x)$ には, 境界条件

$$\text{(3)} \quad \Psi(x) = 0 \qquad \text{for } |x| > a$$

が課される (もちろん, Ψ は $|x| = a$ で連続である).

この問題を変分法で解こうとするとき, 上の境界条件から, 試行関数として, 例えば,

$$\text{(4)} \quad \Psi_\lambda(x) = a^\lambda - |x|^\lambda$$

を思いつく ($\lambda \in \mathbb{R}$ は変分パラメタ).

1. この試行関数を用いて, 変分法で, 基底エネルギーの近似値を求めよ.

2. この系の厳密な基底状態は,

$$\text{(5)} \quad \Psi(x) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{a}} \cos \frac{\pi x}{2a} & \text{for } |x| < a \\ 0 & \text{for } |x| > a \end{cases}$$

   であることが示せる．これから厳密な基底エネルギーを計算し, 上の近似値と比較せよ.

教科書を買っていない人のための摂動論の公式集

縮退のない場合　非摂動 Hamiltonian を H_0, その固有関数, エネルギー固有値を $\psi_1, \psi_2, \ldots,$ $E_1 < E_2 < \cdots$ とする．摂動をうけた Hamiltonian を $H = H_0 + \lambda V$ とすると, その固有関数 ϕ_n, エネルギー固有値 W_n は, λ に関する巾級数として,

$$\text{(6)} \quad W_n = E_n + \lambda \langle \psi_n | V | \psi_n \rangle + \lambda^2 \sum_{k \neq n} \frac{\langle \psi_n | V | \psi_k \rangle \langle \psi_k | V | \psi_n \rangle}{E_n - E_k} + \cdots,$$

$$\text{(7)} \quad \phi_n = \psi_n + \lambda \sum_{k \neq n} \frac{\langle \psi_k | V | \psi_n \rangle}{E_n - E_k} \psi_k + \lambda^2 \times (\text{ 複雑 [1, 例題 4.1]}) + \cdots$$

(ほとんど) 縮退のある場合　非摂動 Hamiltonian を H_0, その固有関数, エネルギー固有値を $\psi_1, \psi_2, \ldots, \psi_a, \psi_{a+1}, \ldots,$ $E_1 < E_2 < \cdots < E_a \approx E_{a+1} < \cdots$ とする. 摂動をうけた Hamiltonian を $H = H_0 + \lambda V$ とすると, $a, a+1$ に対応する 固有関数 ϕ_n, エネルギー固有値 W_n は, λ に関する巾級数として,

$$W_a = W_a^{(0)} + \lambda W_a^{(1)} + \lambda^2 \sum_{k \neq a, a+1} \frac{\left\langle \phi_a^{(0)} | V | \psi_k \right\rangle \left\langle \psi_k | V | \phi_a^{(0)} \right\rangle}{W_a^{(0)} - E_k} + \cdots, \tag{8}$$

$$\phi_a = \phi_a^{(0)} + \lambda \sum_{k \neq a, a+1} \frac{\left\langle \psi_k | V | \phi_a^{(0)} \right\rangle}{W_a^{(0)} - E_k} \psi_k + \lambda^2 \times (\text{複雑}) + \cdots. \tag{9}$$

ただし, $\phi_a^{(0)}, W_a^{(0)} + \lambda W_a^{(1)}, \phi_{a+1}^{(0)}, W_{a+1}^{(0)} + \lambda W_{a+1}^{(1)}$ は, ψ_a と ψ_{a+1} の間で対角化を行なって決める.

1 次の摂動のもとで縮退が残る場合には別の考察が必要.

参考文献

[1] 中嶋, 吉岡, 例解 量子力学演習, 物理入門コース / 演習 3 (1991) 岩波書店.

[2] L. I. Schiff, *Quantum Mechanics*, 3rd edition, McGraw-Hill (1968).

[3] J. J. Sakurai, *Modern Quantum Mechanics*, Benjamin (1985)