量子力学II　演習問題 10

2018 年 6 月 16 日

1　2次元等方的調和振動子に対する摂動

一次元調和振動子 $\hat{H}_{HO} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}\hat{x}^2$ においては、消滅演算子を

$$\hat{a} = \frac{\hat{p}}{\sqrt{2m\hbar\omega}} - \mathrm{i}\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x}$$

と定義すると、基底状態 $|0\rangle$ は $\hat{a}\,|0\rangle = 0$ によって定義され、第 n 励起状態 $|n\rangle$ は $|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}\left(\hat{a}^\dagger\right)^n|0\rangle$ と書くことができる。また、$n \geq 0$ に対して $|n\rangle$ に対応する固有エネルギー E_n は $E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)$ で与えられる。このことを用いて次のような 2 次元等方的調和振動子 $\hat{H}_0$ に対する摂動論を考える。

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{\hat{p}_y^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}\left(\hat{x}^2 + \hat{y}^2\right)$$

(1) 非摂動ハミルトニアン $\hat{H}_0$ について、固有エネルギーの小さい順にエネルギー固有状態を並べたとき、先頭から 3 番目までの固有状態と、それらに対応するエネルギー固有値を求めよ。

次に $\hat{H}_0$ に対して、次のように与えられる摂動項 $\hat{V}$ を加える。

$$\hat{V} = gmw^2\hat{x}\hat{y}$$

ここで g は無次元の微小量である。

(2) $\hat{H}_0$ を非摂動ハミルトニアン、$\hat{V}$ を摂動項として摂動論を適用する。このとき、(1) で求めた 3 つの状態に対し、補正後の 1 次の固有エネルギーおよび対応する 0 次のエネルギー固有状態を求めよ。ここで、「補正後の 1 次の固有エネルギー」とは無摂動エネルギーと 1 次のエネルギー補正の和を指す。

(3) $\hat{H} := \hat{H}_0 + \hat{V}$ を厳密に解き、固有エネルギーの小さい順にエネルギー固有状態を並べたときに先頭から 3 番目までの固有状態に対応するエネルギー

固有値を求めよ。それらを g について 1 次まで展開して (2) の結果と比較せよ。
(ヒント：$\hat{H}$ を厳密に解くには、次のような変数変換をするとよい。)

$$x' = \tfrac{1}{\sqrt{2}}(x+y)$$
$$y' = \tfrac{-1}{\sqrt{2}}(x-y)$$

2　ヘリウム原子の基底状態

ヘリウム原子の基底状態の固有エネルギーを近似的に求めよう。ハミルトニアンは次のように与えられる。

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}_1^2}{2m} + \frac{\hat{\mathbf{p}}_2^2}{2m} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\left(-\frac{2}{\hat{r}_1} - \frac{2}{\hat{r}_2} + \frac{1}{\hat{r}_{12}}\right)$$

ここで、1, 2 は 2 つの電子を区別するラベルであり、$\hat{r}_{12} = |\hat{\mathbf{r}}_1 - \hat{\mathbf{r}}_2|$ である。$\hat{H}$ を $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$ のように分解する。

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{\mathbf{p}}_1^2}{2m} + \frac{\hat{\mathbf{p}}_2^2}{2m} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\left(-\frac{2}{\hat{r}_1} - \frac{2}{\hat{r}_2}\right), \quad \hat{V} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\frac{1}{\hat{r}_{12}}$$

$\hat{V}$ を $\hat{H}_0$ に対する摂動とみなして、1 次摂動の範囲で基底状態の固有エネルギーを求めよ。なお、計算する上で次の公式を用いよ。

$$\frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{r_<^k}{r_>^{k+1}} P_k(\cos\theta)$$

ここで、$r_> = \max(r_1, r_2), r_< = \min(r_1, r_2)$ であり、$P_k(x)$ はルジャンドル多項式、θ は 2 つのベクトル $\mathbf{r}_1$ と $\mathbf{r}_2$ のなす角である。また、ルジャンドル多項式が満たす次の性質も用いよ。

$$\int_{-1}^{1} P_m(x)P_n(x)\mathrm{d}x = \frac{2}{2n+1}\delta_{mn}$$

参考のために、水素様原子に対するエネルギー固有値と固有関数を示す。

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\frac{Z}{\hat{r}}$$

に対して、固有エネルギーは Bohr 半径 $a_0 = \frac{\hbar^2 4\pi\epsilon_0}{me^2}$ を用いて

$$E_n = -\frac{\mathrm{e}^2}{4\pi\varepsilon_0 a_0} \cdot \frac{Z^2}{2\mathrm{n}^2}$$

であり、固有関数は $\psi_{nlm}(r,\theta,\phi) = R_{nl}(r)\Theta_{lm}(\theta)\Phi_m(\phi)$ である。特に基底状態については、$a = a_0/Z, \quad \rho = (2Z/na_0)\,r$ として

$$R_{10}(r) = a^{-3/2} 2e^{-\rho/2}, \quad \Theta_{00}(\theta) = 1/\sqrt{2}, \quad \Phi_m(\phi) = \sqrt{1/2\pi}e^{im\phi}$$

である。

3　スピンの対に対する時間に依存する摂動

　スピン 1/2 の粒子 2 個からなる系についてスピン自由度のみを考える。このとき、ヒルベルト空間は 4 次元となり、$\{|{+}{+}\rangle, |{+}{-}\rangle, |{-}{+}\rangle, |{-}{-}\rangle\}$ は基底をなす。ここで、$|m_1 m_2\rangle$ は $\hat{s}_{1z}$ と $\hat{s}_{2z}$ の同時固有状態であり、次を満たす。

$$\hat{s}_{iz} |m_1 m_2\rangle = m_i \frac{\hbar}{2} |m_1 m_2\rangle \qquad (i = 1, 2, \quad m_i = +, -)$$

ハミルトニアンは次のように与えられる。

$$\hat{H} = \begin{cases} 0 & (t \leq 0) \\ \hat{V} & (t > 0) \end{cases}$$

ここで、$\hat{V}$ は次のように与えられる。

$$\hat{V} = \frac{4\Delta}{\hbar^2} \hat{\mathbf{s}}_1 \cdot \hat{\mathbf{s}}_2$$

$t \leq 0$ において、系は $|{+}{-}\rangle$ の状態にあったとする。

(1) 問題を厳密に解くことにより、時刻 t において系が $|{+}{+}\rangle, |{+}{-}\rangle, |{-}{+}\rangle, |{-}{-}\rangle$ のそれぞれの状態に見出される確率を t の関数として求めよ。

(2) $\hat{V}$ を $t = 0$ において加えられた摂動項とみなして、時間に依存する 1 次の摂動論を適用することにより、時刻 t において系が $|{+}{+}\rangle, |{+}{-}\rangle, |{-}{+}\rangle, |{-}{-}\rangle$ のそれぞれの状態に見出される確率を t の関数として求めよ。

(3) (1) と (2) で得られた結果を比較し、時間に依存する 1 次の摂動論がどのような条件下で良い近似となるかを述べよ。