

量子力学 II 演習問題 [第 13 回] 提出の必要なし

水素原子（スピンは考えない）を一様な z 方向正の向きで強さ E の電場 ($\mathbf{E} = (0, 0, E)$) の中に置く。ハミルトニアンは

$$\hat{H}_{\text{電場中の水素原子}} = \hat{H}_0 + \hat{V}, \quad \hat{H}_0 = \hat{H}_{\text{水素原子}}, \quad \hat{V} = -eE\hat{z}$$

で与えられる。 \hat{H}_0 の固有状態 $|n, \ell, m\rangle_0$ の座標表示を $\langle \mathbf{r} | n, \ell, m\rangle_0 = \psi_{n,\ell}^m(\mathbf{r})$ とする。基底状態 ($n = 1$, $1s$ 状態) は縮退しておらず、波動関数はボーア半径 $a_B = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{m_e e^2}$ を用いて

$$\psi_{1,0}^0(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_B^3}} e^{-r/a_B}$$

となる。第 1 励起状態 ($n = 2$) は $2s$ ($\ell = 0$) と $2p$ ($\ell = 1$) が縮退しており、磁気量子数 $m = 0$ の状態の波動関数は

$$\psi_{2,0}^0(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{8\pi a_B^3}} \left(1 - \frac{r}{2a_B}\right) e^{-r/(2a_B)}, \quad \psi_{2,1}^0(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{8\pi a_B^3}} \frac{r}{2a_B} e^{-r/(2a_B)} \cos\theta$$

である。極座標表示の 3 次元体積積分は

$$\int d^3\mathbf{r} = \int_0^\infty dr r^2 \int_0^\pi d\theta \sin\theta \int_0^{2\pi} d\phi = \int_0^\infty dr r^2 \int_{-1}^1 d[\cos\theta] \int_0^{2\pi} d\phi$$

である。以下の問いに答えよ。

1. 基底状態の波動関数 $\psi_{1,0}^0(\mathbf{r})$ が規格化されている ($\int d^3\mathbf{r} |\psi_{1,0}^0(\mathbf{r})|^2 = 1$) ことを示せ。
2. 完全性 $\int d^3\mathbf{r} |\mathbf{r}\rangle\langle \mathbf{r}| = \hat{1}$ を利用して、行列要素 ${}_0\langle n', \ell', m' | \hat{V} | n, \ell, m \rangle_0$ を座標表示の波動関数の積分を用いて表せ。
3. 基底状態の \hat{V} によるエネルギーのずれを縮退のない摂動論の公式 $E_1^{(1)} = {}_0\langle 1, 0, 0 | \hat{V} | 1, 0, 0 \rangle_0$ を用いて計算し、 $\cos\theta$ 積分の性質を用いて $E_1^{(1)} = 0$ になることを示せ。
4. 第 1 励起状態は縮退しているので、縮退のある摂動論の公式を用いて計算する。行列要素 ${}_0\langle 2, 0, 0 | \hat{V} | 2, 0, 0 \rangle_0$ と ${}_0\langle 2, 1, 0 | \hat{V} | 2, 1, 0 \rangle_0$ は $E_1^{(1)}$ と同様に 0 になることを示せ。
5. 波動関数 $\psi_{n,\ell}^m(\mathbf{r})$ は \hat{L}_z の固有状態であることから、磁気量子数が m の状態の波動関数の ϕ 依存性は $e^{im\phi}$ である。 \hat{V} の座標表示が ϕ を含まないことから、磁気量子数の異なる状態の行列要素 ${}_0\langle 2, \ell', m' | \hat{V} | 2, \ell, m \rangle_0$ (ただし $m' \neq m$) が 0 になることを ϕ 積分の性質を用いて示せ。
6. 以上より、摂動計算で有限となる行列要素は ${}_0\langle 2, 1, 0 | \hat{V} | 2, 0, 0 \rangle_0$ と ${}_0\langle 2, 0, 0 | \hat{V} | 2, 1, 0 \rangle_0$ である。これらを座標表示を用いて計算せよ。
7. ${}_0\langle 2, \ell, 0 | \hat{V} | 2, \ell, 0 \rangle_0$ ($\ell = 0, 1$) を成分を持つ行列の固有値から電場による第 1 励起状態のエネルギーのずれを求めよ。