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（$\boldsymbol{E}=(0,0,E)$）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 $\langle\boldsymbol{r}|n,\ell,m\rangle_0=\psi^m_{n,\ell}(\boldsymbol{r})$ 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 $a_B=\frac{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}{m_e e^2}$ を用いて

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

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

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

である。極座標表示の 3 次元体積積分は

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

である。次の問に答えよ。

1. 基底状態の波動関数 $\psi^0_{1,0}(\boldsymbol{r})$ が規格化されている（$\int d^3\boldsymbol{r}|\psi^0_{1,0}(\boldsymbol{r})|^2=1$）ことを示せ。
2. 完全性 $\int d^3\boldsymbol{r}\,|\boldsymbol{r}\rangle\langle\boldsymbol{r}|=\hat{1}$ 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 $\psi^m_{n,\ell}(\boldsymbol{r})$ 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. $\psi^{\pm1}_{1,1}(\boldsymbol{r})$ も $\cos\theta$ に比例するため、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. ${}_0\langle 2,\ell,0|\,\hat{V}\,|2,\ell,0\rangle_0$（$\ell=0,1$）を成分に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。
