東工大院試 平成31年度 午後

2 質量 μ

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}r + \frac{1}{2}\mu\omega^2 r^2 + \frac{\hat{L}^2}{2\mu r^2}$$

$$\psi(r,\theta,\phi) = \frac{\chi_l(r)}{r}Y_l^m(\theta,\phi)$$

(1) $a = \frac{\mu\omega}{\hbar}$, $k^2 = \frac{2\mu E}{\hbar^2}$

$\hat{H}\psi = E\psi$

$$\hat{H}\frac{\chi_l(r)}{r}Y_l^m(\theta,\phi)$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}r\frac{\chi_l}{r}Y_l^m + \frac{1}{2}\mu\omega^2 r^2\psi + \frac{\hat{L}^2}{2\mu r^2}\frac{\chi_l}{r}Y_l^m$$

$$= E\psi$$

ψで両辺を割る $\left(\psi = \frac{\chi_l}{r}Y_l^m\right)$ $(\because \chi_l = X)$

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{\chi_l Y_l^m}Y_l^m\ddot{X} + \frac{1}{2}\mu\omega^2 r^2 + \frac{1}{2\mu r^2 Y_l^m}\hat{L}^2 Y_l^m$$

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\ddot{X}}{X} + \frac{1}{2}\mu\omega^2 r^2 + \frac{\hat{L}^2 Y}{2\mu r^2}\frac{1}{Y} = E$$

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right]$$

と

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial Y}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2 Y}{\partial\phi^2} + \lambda Y = 0$$

$\hat{L}^2$にYを作用.

$$\hat{L}^2 Y = -\hbar^2\underbrace{\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial Y}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2 Y}{\partial\phi^2}\right]}_{-\lambda Y}$$

$$\hat{L}^2 Y = -\hbar^2 \times -\lambda Y$$

$$= \hbar^2\lambda Y \qquad \text{問題文より } \lambda = l(l+1)$$

$$= \hbar^2 l(l+1)Y_l^m$$

ここで $\hat{L}^2 Y = \hbar^2 l(l+1)Y_l^m$ $(l = 0,1,2\cdots)$ より

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\ddot{X}}{X} + \frac{1}{2}\mu\omega^2 r^2 - E = -\frac{\hbar^2 l(l+1)Y}{2\mu r^2}\frac{1}{Y}$$

$$= -\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2}$$

$\times -2\mu r^2$

$$\hbar^2 r^2\frac{\ddot{X}}{X} - \mu^2 r^4\omega^2 + 2\mu r^2 E = \hbar^2 l(l+1)$$

$$\frac{\ddot{X}}{X} - \frac{\mu^2 r^2\omega^2}{\hbar^2} + \frac{2\mu E}{\hbar^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} = 0$$

$$\ddot{X} + \left(-\underbrace{\frac{\mu^2 r^2\omega^2}{\hbar^2}}_{a^2\omega^2} + \underbrace{\frac{2\mu E}{\hbar^2}}_{k^2} - \frac{l(l+1)}{r^2}\right)X = 0$$

$$\ddot{X} + \left(-a^2\omega^2 + k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2}\right)X = 0$$ //

(2) a_nの漸化式 係子部分.

$$\rho^2 - \alpha(2l+4n+3) = 0$$

となればよい

↳ ($u_l(\rho) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n r^{2n}$ $n\to\infty$ で0に収束してほしい)

⟺ $\rho^2 = \alpha(2l+4n+3)$

$\rho^2 = \frac{2\mu E}{\hbar^2}$ より

↪ $$E = \frac{\rho^2\hbar^2}{2\mu}$$

$$= \frac{\hbar^2\alpha}{2\mu}(2l+4n+3)$$

$$= \frac{\hbar^2\alpha}{\mu}\left(l+2n+\frac{3}{2}\right)$$

主量子数 $n=0$ はありえる?

(3) 第一励起・第二励起においてエネルギーの縮退度を求める

基底状態: $(l,n)=(0,0) = \frac{3}{2}\hbar\omega$

方位量子数 $(2l+1)$重縮退 より

$$(2\times0+1) = 1$$

第一励起: $(l,n) = (1,0) = \frac{5}{2}\hbar\omega$

$(2\times1+1) = 3$ 重縮退

第二励起 $(l,n)=(2,0)$ or $(0,1)$

$$(2\cdot2+1)+(2\cdot0+1) = 6$$

g.s は grand state 基底状態

(4) $\hat{V} = \beta\alpha^2 r^4$

規格化された基底状態の波動関数

$$\psi_{g.s}(r,\theta,\phi) = \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{\frac{3}{4}} \exp\left(-\frac{\alpha}{2}r^2\right)$$

ΔE を β の1次まで求める

$$\Delta E^{(1)} = \langle\psi_{g.s}|\hat{V}|\psi_{g.s}\rangle$$

$$= \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{\frac{3}{2}}\beta\alpha^2\int_0^{\infty} e^{-\alpha r^2} r^4\, r^2 dr \int_0^{\pi}\sin\theta\, d\theta \int_0^{2\pi} d\phi$$

4π

$r^2\sin\theta$ はヤコビアンだっけ?

$$= 4\pi\left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{\frac{3}{2}}\beta\alpha^2\int r^6 e^{-\alpha r^2} dr$$

ガウス積分公式

$$\int_0^{\infty} x^{2n} e^{-ax^2} dx = \frac{(2n-1)!!}{2^{n+1}a^n}\sqrt{\frac{\pi}{a}}$$

より $n=3$

$$= 4\pi\left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{\frac{3}{2}}\beta\alpha^2 \frac{(2\cdot3-1)!!}{2^4\alpha^3}\sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}$$

$$= 4\pi\left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{\frac{3}{2}}\beta\alpha^2 \frac{5!!}{2^4\alpha^3}\sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}$$

$$= \frac{\alpha}{\pi}\cancel{\pi}\beta \frac{5!!}{2^2\alpha}$$

$$= \frac{5!!}{2^2}\beta$$

$$= \frac{5\times3\times1}{4}\beta = \frac{15}{4}\beta$$

(5) Ψ は $\varphi_{g.s}$ と $\ell=1$ の $\varphi_{\ell=1}^{n=0}$ と重ね合わせ。

$\Psi = \left(1 - i\frac{\epsilon}{\hbar}\hat{p}_z\right)\varphi_{g.s}$

ア は 1

$= \varphi_{g.s} - i\frac{\epsilon}{\hbar}\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial z}\varphi_{g.s}$

$= \varphi_{g.s} - \epsilon\frac{\partial}{\partial z}\varphi_{g.s}$

$\frac{\partial}{\partial z}\varphi_{g.s} = \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{\frac{3}{4}}\frac{\partial}{\partial z}e^{-\frac{\alpha}{2}r^2}$

$r\cos\theta = z$

$\frac{\partial z}{\partial r} = \cos\theta$ より

$\frac{\partial r}{\partial z} = \cos\theta$ じゃ… ミス?

$= \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{\frac{3}{4}}\frac{\partial r}{\partial z}\frac{\partial}{\partial r}e^{-\frac{\alpha}{2}r^2}$

$= \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{\frac{3}{4}}\cos\theta \times (-\alpha r)\, e^{-\frac{\alpha}{2}r^2}$

(問題文より $\ell=1$ のとき

$\varphi = \frac{\chi_\ell}{r}Y$ より

$\chi_1 = \sqrt{\frac{8}{3}}\left(\frac{\alpha^5}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} r^2 e^{-\frac{\alpha r^2}{2}}$ より)

$= -\left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{\frac{1}{2}}\cos\theta\left(\frac{\alpha^5}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} \times \frac{1}{~~(\alpha^5/\pi)^{1/4}~~} \times \alpha r\, e^{-\frac{\alpha}{2}r^2}$

$= -\sqrt{\frac{\alpha}{\pi}}\cos\theta\left(\frac{\alpha^5}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} \cdot r\, e^{-\frac{\alpha}{2}r^2}$

$= -\sqrt{\frac{\alpha}{\pi}}\cos\theta \times \sqrt{\frac{3}{8}} \times \frac{1}{r} \times \underbrace{\sqrt{\frac{8}{3}} \times r^2\left(\frac{\alpha^5}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}}e^{-\frac{\alpha}{2}r^2}}_{\chi_1(r)}$

$= -\sqrt{\frac{\alpha}{\pi}}\frac{\cos\theta}{r}\sqrt{\frac{3}{8}}\chi_1(r)$

問題文より

$\left(Y_1^0(\theta,\phi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta \right)$ より

$= -\sqrt{\frac{\alpha}{\pi}} \cdot \sqrt{\frac{3}{8}} \cdot \sqrt{\frac{4\pi}{3}} \cdot \underbrace{\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta}_{Y_1^0}\ \frac{\chi_1(r)}{r}$

$= -\sqrt{\frac{\alpha}{2}}\frac{\chi_1(r)}{r}Y_1^0(\theta,\phi)$

$= -\sqrt{\frac{\alpha}{2}}\varphi_{\ell=1}^{n=0}$

よって $\Psi = \varphi_{g.s}\left(1 - \epsilon\frac{\partial}{\partial z}\right)$

$= \varphi_{g.s} + \sqrt{\frac{\alpha}{2}}\epsilon\,\varphi_{\ell=1}^{n=0}$

ア = 1

イ : $\sqrt{\frac{\alpha}{2}}$ ← ε は?

ウ : 0

(b) $t=0$. $\hat{H}$ で時間発展

$\langle z \rangle = (\Psi(t), \hat{z}\Psi(t))$

を t の関数で求める。

(a) より

$\Psi(t) = e^{-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}}\left(\varphi_{g.s} + \sqrt{\frac{\alpha}{2}}\epsilon\,\varphi_{\ell=1}\right)$ これはどこから?

H と $\varphi_{g.s}$ は交換可能なことに注意

ここで

$\hat{H}\varphi_{g.s} = \frac{3}{2}\hbar\omega\,\varphi_{g.s}$ ← 基底状態

$\hat{H}\varphi_{\ell=1}^{n=0} = E\varphi_{\ell=1}^{n=0}$, $E = \hbar\omega\left(\ell + 2n + \frac{3}{2}\right)$
$= \left(\frac{5}{2} + 2n\right)\hbar\omega$

$$\therefore \Psi(t) = \varphi_{g.s}\, e^{-i\frac{3}{2}\omega t} + \sqrt{\frac{\alpha}{2}}\,\varepsilon\,\varphi_{\ell=1}^{n=0}\, e^{-i\left(\frac{5}{2}+2n\right)\omega t}$$

$$\left(\varphi e^{-} + \sqrt{\tfrac{\alpha}{2}}\,\varphi_i e^{-}\right)\left(\varphi e^{+} + \sqrt{\tfrac{\alpha}{2}}\,\varphi_i e^{+}\right)$$

$$\Psi^{*}(t)\, z\, \Psi(t)$$

2次はいい

$$= z\left\{ \varphi_{g.s}^{2} + \frac{\alpha}{2}\varepsilon^{2}\left(\varphi_{\ell=1}^{n=0}\right)^{2} + \sqrt{\frac{\alpha}{2}}\,\varepsilon\,\varphi_{g.s}\varphi_{\ell}^{n}\left(e^{i(1+2n)\omega t} + e^{-i(1+2n)\omega t}\right)\right\}$$

$$= z\left\{ \underbrace{\varphi_{g.s}^{2}}_{①} + \underbrace{\varepsilon\sqrt{2\alpha}\,\varphi_{g.s}\varphi_{\ell=1}^{n=0}\cos(2n+1)\omega t}_{②} \right\}$$

$\cos\theta = \dfrac{e^{i\theta}+e^{-i\theta}}{2}$ より

$$\therefore \langle z\rangle = \int r^{2}dr \int \sin\theta\, d\theta \int d\phi\; \Psi^{\dagger}\cdot z\cdot \Psi$$

直交関係より

$$\int_{0}^{\pi}\cos\theta\sin\theta\, d\theta = 0$$

よって ① は $z = r\cos\theta$ の $\cos\theta$ と $\sin\theta$ で 0 になるので、

② を考える。

$$\frac{\varphi_1}{r} = \sqrt{\frac{8}{3}}\, r\left(\frac{\alpha^{5}}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{\alpha r^{2}}{2}}$$

$$Y_{1}^{0} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta$$

$$\therefore \langle z\rangle = \int dr\int d\theta\int d\phi\cdot \varepsilon\sqrt{2\alpha}\,\underbrace{\left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{\frac{3}{4}} e^{-\frac{\alpha}{2}r^{2}}}_{\varphi_{g.s}} \cdot \underbrace{\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta\sqrt{\frac{8}{3}}\, r\left(\frac{\alpha^{5}}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{\alpha r^{2}}{2}}}_{\varphi_{\ell=1}^{n=0}}$$

$$\times \cos(2n+1)\omega t$$

$$\times\, r^{2}\sin\theta$$

$$\times\, r\cos\theta$$

$$= \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\sqrt{\frac{8}{3}}\,\varepsilon\sqrt{2\alpha}\left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{\frac{3}{4}}\left(\frac{\alpha^{5}}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}}$$

$$\times \int e^{-\frac{\alpha}{2}r^{2}}\, r\, e^{-\frac{\alpha}{2}r^{2}}\, r^{2}dr \times r$$

$$\times \int \sin\theta\cos^{2}\theta\,\cos(2n+1)\omega t\, d\theta$$

$$\times \underbrace{\int d\phi}_{2\pi}$$

$$= \underbrace{2\pi\sqrt{4\frac{\alpha}{\pi}}\,\varepsilon\left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{\frac{3}{4}}\left(\frac{\alpha^{5}}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}}\cos(2n+1)\omega t}_{③}$$

$$\times \underbrace{\int r^{4}e^{-\alpha r^{2}}dr}_{④}$$

$$\times \underbrace{\int \cos^{2}\theta\sin\theta\, d\theta}_{⑤}$$

$$③ = 4\sqrt{\pi}\,\varepsilon\,\alpha^{\frac{1}{2}}\alpha^{\frac{3}{4}}\alpha^{\frac{5}{4}}\frac{1}{\pi}\cos(2n+1)\omega t$$

$$= 4\frac{1}{\sqrt{\pi}}\,\varepsilon\,\alpha^{\frac{5}{2}}\cos(2n+1)\omega t$$

④ がガウス積分より

$n = 2$

$$\int r^{4}e^{-\alpha r^{2}}dr = \frac{(4-1)!!}{2^{3}\alpha^{2}}\sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}$$

$$= \frac{3\times 1}{8\,\alpha^{2}}\sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}$$

$$= \frac{3}{8}\sqrt{\frac{\pi}{\alpha^{5}}}$$

⑤ $\cos(\theta+\theta) = \cos\theta\cos\theta - \sin\theta\sin\theta$

$= \cos^2\theta - (1-\cos^2\theta)$

$= 2\cos^2\theta - 1$

$\cos^2\theta = \frac{\cos 2\theta + 1}{2}$

$t = \cos\theta$ $\quad\quad$ θ $0 \to 2\pi$

$dt = -\sin\theta\, d\theta$ $\quad\quad$ t $1 \to -1$

$$\int_0^{\pi} \cos^2\theta \sin\theta\, d\theta$$

$$= -\int_{-1}^{1} t^2 \times (-dt)$$

$$= \int_{-1}^{1} t^2 dt$$

$$= \left[\frac{1}{3}t^3\right]_{-1}^{1}$$

$$= \frac{1}{3} - \left(-\frac{1}{3}\right)$$

$$= \frac{2}{3}$$

よって

$$4\pi^{-\frac{1}{2}} \varepsilon \alpha^{\frac{5}{2}} \cos(2n+1)\omega t \times \frac{3}{\beta}\sqrt{\frac{\pi}{\alpha^5}} \times \frac{2}{3}$$

$$= 4\varepsilon \pi^{-\frac{1}{2}} \alpha^{\frac{5}{2}} \pi^{\frac{1}{2}} \alpha^{-\frac{5}{2}} \cos(2n+1)\omega t \times \frac{2}{3} \times \frac{3}{\beta}$$

$$= 4\varepsilon \frac{2}{\beta} \frac{\beta}{8} \cos(2n+1)\omega t$$

$$= \varepsilon \cos(2n+1)\omega t$$

(1) $\begin{cases} \hat{H}\psi = E\psi \\ \psi = \frac{\chi_l}{r} Y \end{cases}$ より

χ_l の微分方程式をたてる。

(2) $\chi_l(r) = r^{l+1} e^{-\frac{\alpha}{2}r^2} u_l(\rho)$

$r \to \infty$，$\chi_l \to 0$ より

$u_l(\rho)$ が 0 になる様にする

(3) (2) のエネルギーの式から。

最低のエネルギーを考える。

(4) $E^{(1)}$ の摂動公式 $\langle \psi | \hat{V} | \psi \rangle$

を用いて、求める

(5) $\Phi = \left(1 - i\frac{\varepsilon}{\hbar}\hat{p}_z\right)\psi_{g.s}$

をひたすら計算

(6) $\langle z \rangle = \int r^2 dr \int \sin\theta\, d\theta \int d\phi$

$\times \Phi^* z \Phi$

よりひたすら計算。