§14 近似法

[1] １次元調和振動子の Hamiltonian

$$\hat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \tag{1}$$

に、微小な摂動 $\hat{H}_1 = eEx$ が加わった。この系におけるエネルギー固有値の変化を、摂動論を用いて摂動の２次まで計算せよ。また、厳密解を求めて摂動論による結果と比較せよ。

[2] １次元井戸型ポテンシャル

$$V(x) = \begin{cases} \infty & x < 0 \\ 0 & 0 < x < L \\ \infty & L < x \end{cases}$$

の基底状態にある荷電粒子に微小電場をかけた。この効果は摂動ポテンシャル $V_1(x) = eEx$ により表せる。基底状態のエネルギー固有値の変化を摂動論を用いて計算せよ。

[3] 基底状態にある水素原子に外から一様な弱い電場 $\mathbf{E}$ を加えると分極が起こり、エネルギー準位が変化する。z 方向にかけられた電場との相互作用 $\hat{H}_1 = eEz$ を摂動として取り扱う。

(a) １次摂動のエネルギー変化が 0 になることを示し、その物理的理由を述べよ。

(b) ２次摂動によるエネルギー変化を評価せよ。但し、簡単のため、エネルギー分母を $E_0^{(0)} - E_m^{(0)} \cong E_0^{(0)}$ と近似せよ（$E_0^{(0)}$：基底状態のエネルギー）。

[4] 中心力ポテンシャルの固有状態で軌道角運動量 $l = 1$ を持つ３つの状態 ψ_{1m} $(m = \pm 1, 0)$ を考える。これらの状態のエネルギーは縮退しているので、そのエネルギーを E_0 とする。この系に摂動

$$\hat{H}_1 = \alpha(\hat{l}_x^2 - \hat{l}_y^2) + \beta\hat{l}_z$$

が加わったときのエネルギー固有値を摂動論を用いて求めよ。

[5] 基底状態にある水素原子に、大きさ B をもつ z 軸方向の外部磁場が加わった。電子の軌道運動に対する Hamiltonian は次式で与えられる。

$$\hat{H} = \frac{1}{2\mu}\left(\hat{\mathbf{p}} + \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2 - \frac{e^2}{r}. \tag{2}$$

ここでは Gauss 単位系を採用し、μ は換算質量、$-e$ は電子の電荷、c は光速、$\mathbf{A}$ はベクトルポテンシャルを表す。

(a) ベクトルポテンシャルを $\mathbf{A}(\mathbf{r}) = \frac{B}{2}\mathbf{e}_z \times \mathbf{r}$ と取れること、すなわち $\boldsymbol{\nabla} \times \mathbf{A} = B\mathbf{e}_z$ を示せ。ただし、$\mathbf{e}_z$ は z 方向の単位ベクトルである。

(b) Hamiltonian を

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1 + \hat{H}_2$$

と $\mathbf{A}$ の次数により展開する。$\hat{H}_1$ が軌道角運動量演算子 $\hat{\mathbf{l}} \equiv \mathbf{r} \times \hat{\mathbf{p}}/\hbar$ を用いて次のように表せることを示せ。

$$\hat{H}_1 = \mu_{\rm B} \hat{l}_z B, \qquad \mu_{\rm B} \equiv \frac{e\hbar}{2\mu c} \text{：Bohr 磁子}.$$

(c) $\hat{H}_1$ の一次摂動による基底状態のエネルギー変化を求めよ。

(d) $\hat{H}_2$ の一次摂動による基底状態のエネルギー変化を求めよ。（この効果を Langevin の反磁性と呼ぶ。）

(e) $\hat{H}_1$ の二次次摂動による基底状態のエネルギー変化を求めよ。ただし、励起状態としては $l = 1$ 状態のみを考慮するものとする。（この効果を van Vleck の常磁性と呼ぶ。）

[6] 前問の Hamiltonian で、磁場が x 方向に加えられた場合 $\mathbf{A}(\mathbf{r}) = \frac{B}{2}\mathbf{e}_x \times \mathbf{r}$ を考える。B の一次の範囲における $n = l = 1$ 状態のエネルギー変化と固有関数を、縮退のある場合の摂動論を用いて求めよ。

[7] Hamiltonian $\hat{H}$ の最小固有値を E_0 とすると、任意の試行関数 ψ に対して

$$\frac{\langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle} \geq E_0$$

となることを示せ。

[8] Hamiltonian $\hat{H}_0$ のエネルギー固有値 E_0 が 2 重に縮退している場合を考え、対応する規格直交化された波動関数を ψ_a および ψ_b とする。この系に次式で与えられる摂動 $\hat{H}_1$ を加える。

$$\langle\psi_a|\hat{H}_1|\psi_a\rangle = \langle\psi_b|\hat{H}_1|\psi_b\rangle = 0, \qquad \langle\psi_a|\hat{H}_1|\psi_b\rangle = \langle\psi_b|\hat{H}_1|\psi_a\rangle = E_1.$$

このとき試行関数として $\psi = \psi_a + \alpha\psi_b$ をとり、α を変分パラメータとして、全系 $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1$ の固有値及び固有状態を近似的に求めよ。

[9] Hamiltonian

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + c\,x^4$$

で記述される 1 次元非調和振動子の基底状態のエネルギーを、次の試行関数を用いて変分法により求めよ。

$$\psi(x) = A\mathrm{e}^{-\alpha x^2/2}.$$

[10] WKB 法（Bohr-Sommerfeld の量子化条件）を用いて $V(x) = a|x|$ $(a > 0)$ のポテンシャルによる束縛状態のエネルギー準位を求めよ。

[11] (1) 式の Hamiltonian に、時間的に周期変化する摂動

$$\hat{H}_1 = \frac{\epsilon}{2} m\omega^2 x^2 \cos\Omega t \qquad (\epsilon \ll 1)$$

が加えられる場合を考える。時刻 $t=0$ で系が $\hat{H}_0$ の基底状態にあるとし、$t>0$ の波動関数 $\phi(x,t)$ を $\hat{H}_0$ の固有関数 ψ_n $(n=0,1,2,\cdots)$ を用いて

$$\phi = \psi_0 + \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n$$

と展開する。

(a) 一次摂動の展開係数 $c_n^{(1)}$ を t の関数として求めよ。

(b) 系が状態 n に励起されるのは Ω と ω の間にどの様な関係がある場合か？

[12] (1) 式の Hamiltonian に、時間と共に減衰する摂動

$$\hat{H}_1 = eExe^{-at}\theta(t) \qquad \theta(t) = \begin{cases} 0 & t<0 \\ 1 & t>0 \end{cases}$$

が加えられる場合を考える。系は時刻 $t=0$ で $\hat{H}_0$ の基底状態にあった。$t\to\infty$ において系が励起状態にある確率を求めよ。