物理学演習 III(量子力学)　　［その場演習 No. 11］　2016. 7. 12

裏面のヒントを参照してよい

1. **【2 原子分子の回転運動 (a)】**
2 原子分子を，慣性能率 I および電気双極子モーメント μ を持つ剛体でモデル化しよう。この剛体を，重心を通る軸のまわりに回転できるように束縛したとき，Schrödinger 方程式は

$$-\frac{\hbar^2}{2I}\frac{d^2\psi}{d\phi^2} = E\psi$$

と書ける。ただし ϕ は回転角 $(0 \leq \phi \leq 2\pi)$ である。これを解くと

$$\psi = \exp\left(-i\sqrt{\frac{2IE}{\hbar^2}}\phi\right)$$

を得るが，$\psi(\phi)$ は ϕ について周期 2π を持つ関数となる必要があり，固有エネルギーは

$$E = E_n^{(0)} = \frac{\hbar^2}{2I}n^2, \quad (n = 0, \pm1, \pm2, \cdots)$$

と整数 n でラベルできる。対応して，固有状態は $\psi_n^{(0)} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{in\phi}$ と書ける。従って，$n = 0$ の固有状態 $\psi_0^{(0)}$ は非縮退，$n \neq 0$ の固有状態は $\psi_n^{(0)}$ と $\psi_{-n}^{(0)}$ とが縮退している。
さて，この回転子を $\phi = 0$ 方向の一様な弱い電場 $\mathcal{E}$ の下に置くと，摂動ハミルトニアンは

$$\mathcal{H}' = -\mu\mathcal{E}\cos\phi$$

となる。以下では $\mathcal{H}'$ による $\psi_n^{(0)}$ へのエネルギーの補正を考える。

(1) $\mathcal{H}'$ の $\psi_n^{(0)}$ に関する行列要素が

$$\mathcal{H}'_{nm} \equiv \int_0^{2\pi} d\phi\ \psi_n^{(0)*}\mathcal{H}'\psi_m^{(0)} = -\frac{\mu}{2}\mathcal{E}\delta_{n,m\pm1}$$

となることを確認せよ。これにより $\mathcal{H}'_{nn} = 0$ なので，全ての $\psi_n^{(0)}$ に対して 1 次の摂動エネルギーはゼロであることがわかる。

(2) 縮退のない固有状態 $\psi_0^{(0)}$ に対し，2 次の摂動エネルギー $E_0^{(2)}$ を求めよ。

2. **【2 原子分子の回転運動 (b)】**
前問で $n \neq 0$ のとき，縮退した固有状態 $\psi_{\pm n}^{(0)}$ に対して 2 次の摂動エネルギーを求め，縮退が解けるかどうか調べよ。

【ヒント】

1. 2 次の摂動エネルギー $E_0^{(2)}$ は

$$E_0^{(2)} = \sum_{m \neq 0} \frac{|\mathcal{H}'_{0m}|^2}{E_0^{(0)} - E_m^{(0)}} \tag{1}$$

で与えられる。

2. 2×2 行列

$$\begin{pmatrix} \displaystyle\sum_{m \neq \pm n} \frac{|\mathcal{H}'_{n,m}|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} & \displaystyle\sum_{m \neq \pm n} \frac{\mathcal{H}'_{n,m}\mathcal{H}'_{m,-n}}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \\ \displaystyle\sum_{m \neq \pm n} \frac{\mathcal{H}'_{-n,m}\mathcal{H}'_{m,n}}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} & \displaystyle\sum_{m \neq \pm n} \frac{|\mathcal{H}'_{-n,m}|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \end{pmatrix} \tag{2}$$

の固有値が，エネルギー $E_n^{(0)}$ を持つ縮退した 2 状態 $\psi_{\pm n}^{(0)}$ に対する 2 次の摂動エネルギーを与える。