(2次元等方調和振動子内の多電子)electrons-in-harmonic-osc-QA2015714A.tex

ハミルトニアンが次のように与えられる2次元等方調和振動子を考える:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right) + \frac{1}{2}m\omega^2(x^2+y^2) \tag{1}$$

1次元調和振動子系の固有値が $\hbar\omega(n+1/2)$, $(n=0,1,2,\cdots)$ であるとして、以下の問いに答えよ。

1 量子数を適当に導入し、このハミルトニアンの固有値を求めよ。

2 この固有値の縮退(縮重)について述べよ。

3 この系に5個の電子がある場合、この5電子系の基底状態のエネルギーを求めよ。ただし、電子のスピン自由度を考慮せよ。

(解答例)

1. このハミルトニアンは変数 x,y について分離されているので、それぞれ x, y についてのハミルトニアン $\hat{H}_x, \hat{H}_y$ を定義する。

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \hat{H}_x + \hat{H}_y, && (2)\\ \hat{H}_x &\equiv -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2, && (3)\\ \hat{H}_y &\equiv -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{1}{2}m\omega^2y^2. && (4) \end{aligned}$$

これらの部分系のハミルトニアン同士はあきらかに交換する：

$$[\hat{H}_x, \hat{H}_y] = 0 \tag{5}$$

したがって、これらの部分系はそれぞれ1次元系の調和振動子となる。部分系のハミルトニアンの固有関数を $\psi_{n_x}(x), \psi_{n_y}(y)$、固有値を、$\hbar\omega(n_x+1/2), (n_x = 0,1,2,\cdots), \hbar\omega(n_y+1/2), (n_y=0,1,2,\cdots)$ とすると、

$$\begin{aligned} \hat{H}_x\psi_{n_x}(x) &= \hbar\omega(n_x+\frac{1}{2})\psi_{n_x}(x), && (6)\\ \hat{H}_y\psi_{n_y}(y) &= \hbar\omega(n_y+\frac{1}{2})\psi_{n_y}(y) && (7) \end{aligned}$$

が成立する。このとき、全系の波動関数を $\psi(x,y)(=\psi_{n_x}(x)\psi_{n_y}(y))$ とすれば、シュレディンガー方程式

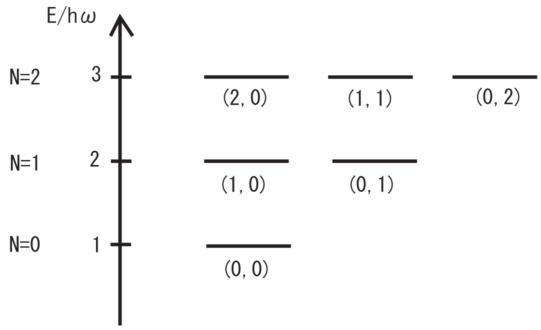
$$\hat{H}\psi(x,y) = E\psi(x,y) \tag{8}$$

が成立する。ただし、全系のエネルギー E は

$$
\begin{aligned}
E_{(n_x,n_y)} &= \hbar\omega(n_x+\frac{1}{2})+\hbar\omega(n_y+\frac{1}{2}) \\
&= \hbar\omega(n_x+n_y+1) \\
&= \hbar\omega(N+1),\ N\equiv n_x+n_y \qquad (9)
\end{aligned}
$$

となる。

2. この結果は、量子数の和 $n_x+n_y(\equiv N)$ が同じであれば、全系の状態を指定する量子数の組 (n_x,n_y) が異なっていても、エネルギーは同じである。すなわち,縮退していることを意味する。　　　今、N が与えられたとすると、図に示され



ているように、組み合わせ $(n_x,n_y)=(N,0),(N-1,1),(N-2,2),\cdots,(0,N)$ という $N+1$ 重の縮退がある。

3. 電子のスピン自由度を考慮した場合、量子数の組 (n_x,n_y) により指定されるひとつの量子状態を 2 個の電子が占有できる。この系に 5 個の電子がある場合、下から順に電子を占有させていくと、この 5 電子系の基底状態エネルギー E は

$$
\begin{aligned}
E &= 2\times\hbar\omega\times(0+1)+3\times\hbar\omega\times(1+1), \\
&= 8\hbar\omega. \qquad (10)
\end{aligned}
$$

(電子のスピン自由度を考慮しない場合: $E=\hbar\omega\times(0+1)+2\times\hbar\omega\times(1+1)+2\times\hbar\omega\times(2+1)=11\hbar\omega$.)