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:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}(\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2) + \frac{1}{2}m\omega^2(x^2 + y^2) \tag{1}$$

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。

$$\hat{H} = \hat{H}_x + \hat{H}_y, \tag{2}$$

$$\hat{H}_x \equiv -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2, \tag{3}$$

$$\hat{H}_y \equiv -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 y^2. \tag{4}$$

これらの部分系のハミルトニアン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 $\psi_{n_x}(x), \psi_{n_x}(x)$、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、

$$\hat{H}_x\psi_{n_x}(x) = \hbar\omega(n_x + \frac{1}{2})\psi_{n_x}(x), \tag{6}$$

$$\hat{H}_y\psi_{n_y}(y) = \hbar\omega(n_y + \frac{1}{2})\psi_{n_y}(y) \tag{7}$$

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

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

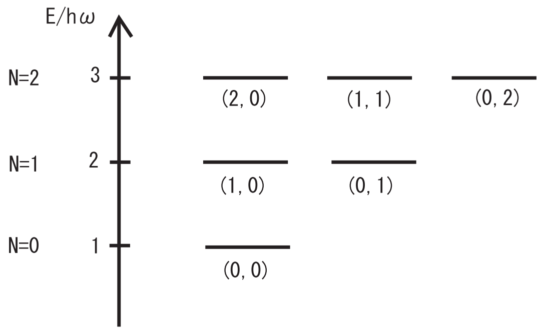
が成立する。ただし、全系のエネルギー E は

$$E = \hbar\omega(n_x + \frac{1}{2}) + \hbar\omega(n_y + \frac{1}{2}), \tag{9}$$

$$= \hbar\omega(n_x + n_y + 1) \tag{10}$$

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

$$
\begin{aligned}
E &= 2 \times \hbar\omega + 3 \times 2\hbar\omega, \\
&= 8\hbar\omega. \qquad (11)
\end{aligned}
$$