

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：

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

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。

$$\hat{H} = \hat{H}_x + \hat{H}_y, \quad (2)$$

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

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

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：

$$[\hat{H}_x, \hat{H}_y] = 0 \quad (5)$$

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、 $\hbar\omega(n_x + 1/2), (n_x = 0, 1, 2, \dots), \hbar\omega(n_y + 1/2), (n_y = 0, 1, 2, \dots)$ とすると、

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

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

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

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

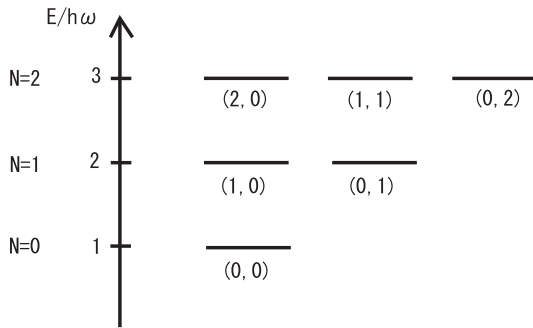
が成立する。ただし、全系のエネルギー E は

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

$$= \hbar\omega(n_x + n_y + 1) \quad (10)$$

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) が異なっているとしても、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 $(n_x, n_y) = (N, 0), (N - 1, 1), (N - 2, 2), \dots, (0, N)$ 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

$$\begin{aligned} E &= 2 \times \hbar\omega \times (0 + 1) + 3 \times \hbar\omega \times (1 + 1), \\ &= 8\hbar\omega. \end{aligned} \quad (11)$$

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