

【解答用紙B】(50%)

問2 水素原子にエネルギー $\hbar\omega$ を持つ光(電磁波)が照射された場合の水素原子中の電子の遷移について答えよ。

(1) 水素原子中の電子の波動関数は、 $\varphi_{n,\ell,m_\ell}(\mathbf{r},\theta,\phi) = R_{n,\ell}(r)Y_{\ell,m_\ell}(\theta,\phi)$ で与えられる。

① 量子数 (n,ℓ,m_ℓ) のそれぞれの名前と取り得る値を答えよ。

(2) 光(電磁波)が照射された場合、光と水素原子の相互作用(電子に働く摂動ポテンシャル) $H'(t)$ は、

$$H'(t) = -\mathbf{er} \cdot \mathbf{E}_0 \cos\omega t = H'(e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}), \text{ ただし } H' = -\frac{1}{2}\mathbf{er} \cdot \mathbf{E}_0 \text{ で与えられる。摂動 } H'(t) \text{ が } t=0 \text{ から加わっ}$$

た時の波動関数を $\Psi(\mathbf{r},t) = \sum_n c_n(t)\varphi_n(\mathbf{r})\exp(-i\frac{E_n^{(0)}}{\hbar}t)$ とする。ここで $\varphi_n(\mathbf{r})$ と $E_n^{(0)}$ は摂動が無い場合の固有関数と固有値で、 $c_n(t)$ は時間に依存する展開係数である。その結果、 $\frac{dc_f(t)}{dt} = -\frac{i}{\hbar} \sum_n c_n(t)H'_{fn}(t)e^{i\omega_{fn}t}$ を得る。

ここで、 $\hbar\omega_{fn} = E_f^{(0)} - E_n^{(0)}$ 、 $H'_{fn}(t) = \int \varphi_f^*(\mathbf{r})H'(t)\varphi_n(\mathbf{r})d\mathbf{r}$ である。これを解くために、 $H'(t)$ を $\lambda H'(t)$ とおき、さらに、 $c_n(t) = c_n^{(0)} + \lambda c_n^{(1)}(t) + \lambda^2 c_n^{(2)}(t) + \dots$ と展開する。

① 系が $t=0$ で i 状態(始状態)にあったとして、 $c_i^{(0)} = 1$ 、 $c_n^{(0)} = 0 (n \neq i)$ で、 $f \neq i$ の場合の $c_f^{(1)}(t)$ を与える式を積分の形で求めよ。

(3) $\langle n',\ell',m_{\ell'} | H' | n,\ell,m_\ell \rangle$ を計算して、 $H'(t)$ に対する遷移の選択則を考える。

① $f(\theta,\phi) = (\sin\theta \cos\phi, \sin\theta \sin\phi, \cos\theta)$ と、 $R_{n,\ell}(r)$ や $Y_{\ell,m_\ell}(\theta,\phi)$ や r,θ,ϕ などを用いて、 $\langle n',\ell',m_{\ell'} | H' | n,\ell,m_\ell \rangle$ を極座標表示で積分の形に書き直せ。

② $Y_{\ell,m_\ell}(\theta,\phi) = (-1)^{(m_\ell+|m_\ell|)/2} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sqrt{\frac{2\ell+1(\ell+|m_\ell|)!}{2(\ell-|m_\ell|)!}} P_\ell^{|m_\ell|}(\cos\theta)e^{im_\ell\phi}$ となる。この式と①の結果より、 m_ℓ に関する遷移の選択則を電場 \mathbf{E}_0 が z 方向の場合と、 (x,y) 方向の場合について求めよ。

③ 次に、 ℓ に関する遷移の選択則を、もっとも簡単な電場 \mathbf{E}_0 が z 方向の場合について考える。最初に、この場合の θ に関する積分式を求めよ。次に、 $\zeta = \cos\theta$ の変数変換を行った積分式を求めよ。ここで、ル

ジャンドル陪関数の漸化式 $\zeta P_\ell^{|m_\ell|}(\zeta) = \frac{\ell+|m_\ell|}{2\ell+1} P_{\ell-1}^{|m_\ell|}(\zeta) + \frac{\ell-|m_\ell|+1}{2\ell+1} P_{\ell+1}^{|m_\ell|}(\zeta)$ を用いて書き直せ。最後に、

$$\int_{-1}^1 P_\ell^{|m_\ell|}(z) P_{\ell'}^{|m_\ell|}(z) dz = \frac{2}{2\ell+1} \frac{(\ell+|m_\ell|)!}{(\ell-|m_\ell|)!} \delta_{\ell\ell'}$$

の直交関係を用いて ℓ に関する遷移の選択則を求めよ。

(4) $t=0$ まで基底状態にいた水素原子に対して、光(電磁波)が照射され、 z 方向に一樣な電場 $\mathbf{E}(t) = E_0 e^{-i\omega t - \gamma t}$ が掛かったとき、以下の間に答えよ。

① 水素原子の基底状態は一般的に何と呼ぶか答えよ。また、その時の量子数の値を答えよ。

② 遷移の選択則が許す最低エネルギーの励起状態は一般的に何と呼ぶか答えよ。また、その時の量子数の値を答えよ。

③ $t \rightarrow \infty$ で基底状態から励起された電子が最低エネルギーの励起状態に見いだされる確率を求めよ。計算を簡単にするため、遷移行列要素を M とせよ。