# レーザー物理学 レポート No.5

82311971 佐々木良輔

## 問 9

### 調和振動子の場合

電荷 $e$ の電気双極子 $\hat{\mu}$ は

$$\hat{\mu} = e\hat{x} \tag{1}$$

である. ここで 1 次元調和振動子においては昇降演算子

$$\begin{aligned} a &= \sqrt{\frac{m\omega_0}{2\hbar}}\left(\hat{x} + \frac{\hbar}{m\omega_0}\frac{d}{dx}\right) \\ a^\dagger &= \sqrt{\frac{m\omega_0}{2\hbar}}\left(\hat{x} - \frac{\hbar}{m\omega_0}\frac{d}{dx}\right) \end{aligned} \tag{2}$$

を用いて

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_0}}\left(a + a^\dagger\right) \tag{3}$$

である. また $|i\rangle$ は正規直交基底を成すため

$$\langle i|j\rangle = \delta_{ij} \tag{4}$$

また昇降演算子を用いて

$$\begin{aligned} a|n\rangle &= \sqrt{n}|n-1\rangle \\ a^\dagger|n\rangle &= \sqrt{n+1}|n+1\rangle \end{aligned} \tag{5}$$

である. したがって $\hat{\mu}$ の行列要素は

$$\begin{aligned} \mu_{mn} &= \langle i|e\hat{x}|j\rangle \\ &= e\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_0}}\langle n|\left(a + a^\dagger\right)|m\rangle \end{aligned} \tag{6}$$

これが非零となるのは $m = n + 1$ または $m = n - 1$ のときである． $m = n + 1$ のとき

$$\begin{aligned} \mu_{n,n+1} &= e\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_0}} \langle n| \left( a + a^\dagger \right) |n+1\rangle \\ &= e\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_0}} \langle n| \left( \sqrt{n+1}|n\rangle + \sqrt{n+2}|n+2\rangle \right) \\ &= e\sqrt{\frac{(n+1)\hbar}{2m\omega_0}} \end{aligned} \tag{7}$$

また $m = n - 1$ かつ $n \geq 1$ のとき

$$\begin{aligned} \mu_{n,n-1} &= e\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_0}} \langle n| \left( a + a^\dagger \right) |n-1\rangle \\ &= e\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_0}} \langle n| \left( \sqrt{n-1}|n-2\rangle + \sqrt{n}|n\rangle \right) \\ &= e\sqrt{\frac{n\hbar}{2m\omega_0}} \end{aligned} \tag{8}$$

である．

## 水素原子の場合

水素原子の波動関数は以下で与えられる．[1]

$$|nlm\rangle = \Psi_{nlm}(r,\theta,\phi) = R_{n,l}(r) Y_{l,m}(\theta,\phi) \tag{9}$$

ここで $R_{n.l}$ は動径方向の波動関数であり

$$R_{n,l}(r) = \frac{n^2 a_B^{3/2}}{2} \sqrt{\frac{(n-l-1)!}{((n+l)!)^3}} \zeta^l e^{-\zeta/2} L_{n+l}^{2l+1}(\zeta) \tag{10}$$

$$\zeta = \frac{2r}{n a_B} \tag{11}$$

ここで $a_B$ はボーア半径, $L_k^j$ は Laguerre の陪多項式であり

$$L_k^j(\zeta) = \frac{d^j}{d\zeta^j} \left( e^\zeta \frac{d^k}{d\zeta^k} (\zeta^k e^{-\zeta}) \right) \tag{12}$$

で与えられる．また $Y_{l,m}$ は角度方向の波動関数であり

$$Y_{l,m}(\theta,\phi) = (-1)^{(m+|m|)/2} \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}} P_l^{|m|}(\cos\theta) e^{im\phi} \tag{13}$$

ここで $P_l^{|m|}$ は Legendre 陪関数であり

$$P_l^m(\xi) = (1-\xi^2)^{m/2} \frac{d^m}{d\xi^m} \left( \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l}{d\xi^l} (\xi^2 - 1)^l \right) \tag{14}$$

で与えられる. したがって $\hat{\mu}$ の行列要素は

$$
\begin{aligned}
\mu &= \langle n'l'm'|e\hat{r}|nlm\rangle \\
&= e\int_0^\infty dr \int_0^\pi d\theta \int_0^{2\pi} d\phi r^2 \sin\theta \Psi^*_{n'l'm'} \hat{r} \Psi_{nlm} \\
&= e\int_0^\infty dr \int_0^\pi d\theta \int_0^{2\pi} d\phi r^3 \sin\theta \Psi^*_{n'l'm'} \Psi_{nlm}
\end{aligned} \tag{15}
$$

この中で $\phi$ に関する積分は

$$
\begin{aligned}
\int_0^{2\pi} d\phi\ e^{-im'\phi} e^{im\phi} &= \int_0^{2\pi} d\phi\ e^{i(m-m')\phi} \\
&= 2\pi\delta_{m',m}
\end{aligned} \tag{16}
$$

であるので, $m' \neq m$ のときには $\mu = 0$ となる. したがって以下では $m' = m$ とする. $\theta$ に関する積分は

$$
\int_0^\pi d\theta\ \sin\theta P_{l'}^{|m|}(\cos\theta) P_l^{|m|}(\cos\theta) \tag{17}
$$

ここで $\cos\theta = x$ とすると積分範囲は $1 \to -1$, $dx = \sin\theta d\theta$ なので (17) は

$$
\begin{aligned}
\int_0^\pi d\theta\ \sin\theta P_{l'}^{|m|}(\cos\theta) P_l^{|m|}(\cos\theta) &= -\int_{-1}^1 dx\ P_{l'}^{|m|}(x) P_l^{|m|}(x) \\
&= -\frac{2}{2l+1}\frac{(l+m)!}{(l-m)!}\delta_{l',l}
\end{aligned} \tag{18}
$$

ここで Legendre 陪関数の直交正を用いた. したがって $l' \neq l$ のときは $\mu = 0$ となるので, 以下では $l' = l$ とする. 以上から角度方向の積分は

$$
\begin{aligned}
&(-1)^{m+|m|}\frac{2l+1}{4\pi}\frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}\int_0^\pi d\theta \sin\theta P_l^{|m|} P_l^{|m|} \int_0^{2\pi} d\phi \\
=&(-1)^{m+|m|}\frac{2l+1}{4\pi}\frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}\left(-\frac{2}{2l+1}\frac{(l+m)!}{(l-m)!}\right)2\pi \\
=&(-1)^{m+|m|+1}
\end{aligned} \tag{19}
$$

となる. 以上から電気双極子の行列成分の非零成分は

$$
\begin{aligned}
\mu_{n',n} &= \langle n'lm|e\hat{r}|nlm\rangle \\
&= (-1)^{m+|m|+1} e \int_0^\infty dr\ r^3 R^*_{n',l}(r) R_{n,l}(r)
\end{aligned} \tag{20}
$$

となる.

## 問 10

与式において $\delta t/2=z$ とすると

$$\begin{aligned}\frac{\Omega_0^2}{\Delta\omega}\int_{-\Delta\omega/2}^{\Delta\omega/2}\frac{1}{\delta^2}\sin^2\frac{\delta}{2}td\delta &= \frac{\Omega_0^2}{\Delta\omega}\int_{-\Delta\omega/2}^{\Delta\omega/2}\frac{t^2}{4z^2}\sin^2 zdz\frac{2}{t} \\ &= \frac{\Omega_0^2}{2\Delta\omega}t\int_{-\Delta\omega/2}^{\Delta\omega/2}\frac{\sin^2 z}{z^2}dz\end{aligned} \tag{21}$$

ここで

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\sin^2 z}{z^2}dz &= \left[-\frac{1}{z}\sin^2 z\right]_{-\infty}^{\infty}+\int_{-\infty}^{\infty}\frac{2}{z}\sin z\cos zdz \\ &= 0+\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\sin 2z}{z}dz \\ &= \int_{-\infty}^{\infty}\frac{\sin\zeta}{\zeta}d\zeta\end{aligned} \tag{22}$$

最後の変形において $2z=\zeta$ とした. ここで図 1 のような積分経路上で以下の積分を考える.

$$\int_C\frac{e^{iz}}{z}dz=\int_r^R\frac{e^{iz}}{z}dz+\int_{C_2}\frac{e^{iz}}{z}dz+\int_{-R}^{-r}\frac{e^{iz}}{z}dz+\int_{C_1}\frac{e^{iz}}{z}dz \tag{23}$$

積分経路内部に極は存在しないため

$$\int_r^R\frac{e^{iz}}{z}dz+\int_{C_2}\frac{e^{iz}}{z}dz+\int_{-R}^{-r}\frac{e^{iz}}{z}dz+\int_{C_1}\frac{e^{iz}}{z}dz=0 \tag{24}$$

となる. $C_1$ 上で $z=re^{i\theta}$ とすると

$$\begin{aligned}\int_{C_1}\frac{e^{iz}}{z}dz &= \int_\pi^0\frac{e^{ire^{i\theta}}}{re^{i\theta}}ire^{i\theta}d\theta \\ &= \int_\pi^0 ie^{ire^{i\theta}}d\theta\end{aligned} \tag{25}$$

ここで $r\to 0$ とすると

$$\lim_{r\to 0}\int_\pi^0 ie^{ire^{i\theta}}d\theta=\int_\pi^0 id\theta=-i\pi \tag{26}$$

となる. また $C_2$ 上で $z=Re^{i\theta}$ とすると

$$\begin{aligned}\int_{C_2}\frac{e^{iz}}{z}dz &= \int_0^\pi\frac{e^{iRe^{i\theta}}}{Re^{i\theta}}iRe^{i\theta}d\theta \\ &= \int_0^\pi ie^{iRe^{i\theta}}d\theta \\ &= \int_0^\pi ie^{iR\cos\theta-R\sin\theta}d\theta\end{aligned} \tag{27}$$

両辺絶対値を取ると

$$
\begin{aligned}
\left|\int_{C_2}\frac{e^{iz}}{z}dz\right| &= \int_0^{\pi} e^{-R\sin\theta}d\theta \\
&= 2\int_0^{\pi/2} e^{-R\sin\theta}d\theta
\end{aligned}
\tag{28}
$$

ここで $0 \le x \le \pi/2$ の範囲で $\sin x \ge 2x/\pi$ より $e^{-R\sin\theta} \le e^{-2Rx/\pi}$ となるので

$$
\begin{aligned}
\left|\int_{C_2}\frac{e^{iz}}{z}dz\right| &\le 2\int_0^{\pi/2} e^{-2R\theta/\pi}d\theta \\
&= -\frac{\pi}{R}\left[e^{-2R\theta/\pi}\right]_0^{\pi/2} \\
&= \frac{\pi}{R}\left(1-e^{-R}\right)
\end{aligned}
\tag{29}
$$

ここで $R \to \infty$ とすると

$$
\left|\int_{C_2}\frac{e^{iz}}{z}dz\right| \le 0 \tag{30}
$$

以上から

$$
\begin{aligned}
0 &= \lim_{r\to 0, R\to\infty}\left(\int_r^R \frac{e^{iz}}{z}dz + \int_{C_2}\frac{e^{iz}}{z}dz + \int_{-R}^{-r}\frac{e^{iz}}{z}dz + \int_{C_1}\frac{e^{iz}}{z}dz\right) \\
&= \int_{-\infty}^{\infty}\frac{e^{iz}}{z} + 0 - i\pi \\
\Longleftrightarrow \quad i\pi &= \int_{-\infty}^{\infty}\frac{e^{iz}}{z}dz
\end{aligned}
\tag{31}
$$

この虚部を取れば

$$
\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\sin x}{x}dx = \pi \tag{32}
$$

以上から (21) 式, (22) 式において $\Delta\omega \to \infty$ とすると

$$
\begin{aligned}
\frac{\Omega_0^2}{\Delta\omega}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{1}{\delta^2}\sin^2\frac{\delta}{2}td\delta &= \frac{\Omega_0^2}{2\Delta\omega}t\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\sin^2 z}{z^2}dz \\
&= \frac{\Omega_0^2}{2\Delta\omega}t\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\sin\zeta}{\zeta}d\zeta \\
&= \frac{\Omega_0^2\pi}{2\Delta\omega}t
\end{aligned}
\tag{33}
$$

を得る.

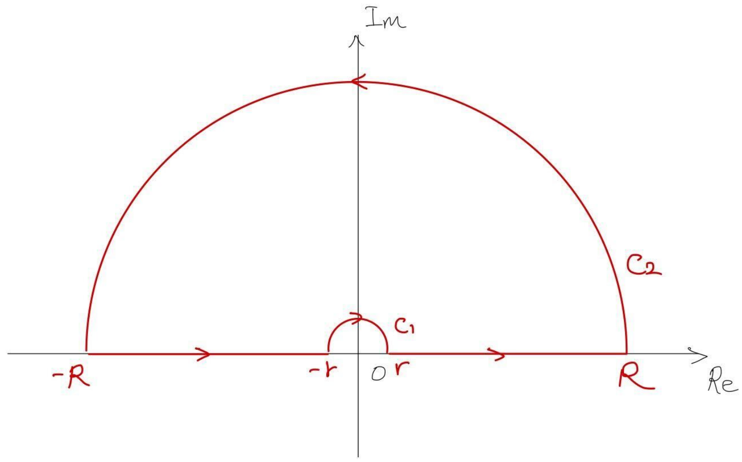


図 1　積分経路

# 参考文献

[1] 幹雄江藤. 量子力学. I. パリティ物理教科書シリーズ. 丸善出版, 東京, 2013.