量子力学 I 演習 問題 (第 9 回)

樋口 さぶろお*

1997 年 6 月 23 日

教科書を買っていない人のための水素原子　水素原子中の電子の量子力学は, 上の中心力場の問題で

$$U(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

とおいた場合に相当する. この場合, 動系方向の波動関数 $\chi(r) = R(r)$ にたいする Schrödinger 方程式

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\chi}{dr^2}(r) + \left(-\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} + \frac{\hbar^2}{2mr^2}\ell(\ell+1)\right)\chi(r) = E\chi(r) \tag{1}$$

を考える (ℓ は方位量子数, すなわち, 角度部分の波動関数の $\mathbf{L}^2$ の固有値が $\ell(\ell+1)\hbar^2$). 方程式 (1) の解は, 固有値の小さい方から $n_r = 1, 2, 3, \ldots$ と番号づけると,

$$\begin{aligned}
&\ell = 0, \quad n_r = 1, \quad \chi(r) \propto \tfrac{r}{a_0}\mathrm{e}^{-r/a_0}. \\
& \quad n_r = 2, \quad \chi(r) \propto \tfrac{r}{a_0}(1 - \tfrac{r}{2a_0})\mathrm{e}^{-r/2a_0}. \\
&\ell = 1, \quad n_r = 1, \quad \chi(r) \propto (\tfrac{r}{a_0})^2\mathrm{e}^{-r/2a_0}. \\
&\ell = \ell, \quad n_r = 1, \quad \chi(r) \propto (\tfrac{r}{a_0})^{\ell+1}\mathrm{e}^{-r/(\ell+1)a_0}.
\end{aligned}$$

などのようになることが知られている (導出は [1, 3-5]). 固有値は, $E = -(\ell + n_r)^{-2} me^4/32\pi^2\epsilon_0^2\hbar^2$. ただし, $a_0 = 4\pi\epsilon_0/e^2 m$ は Bohr 半径.

普通は, 解を label するのに, (ℓ, n_r) でなく, $(n, \ell) = (n_r + \ell, \ell)$ を用いる. $n = 1, 2, 3, \ldots, \ell = 0, 1, 2, \ldots, n-1$ である. n を主量子数という. $R_2 0(r), \chi_{21}(r)$ などとかいたら, $R_{n=2,\ell=0}(r), \chi_{n=2,\ell=1}(r)$ という意味である. $\ell = 0, 1, 2, \ldots$ のかわりに, 記号 s,p,d,f,... を使うこともある.

*hig@rice.c.u-tokyo.ac.jp, URL: http://rice.c.u-tokyo.ac.jp/~hig/,
へや: 駒場 4 号館 413B(学生室の隣) 氷上研究室, でんわ: (03)54.54.67.35

[9-1]　水素原子

量子数 $(n = 2, \ell = 1, m = -1)$ で表される波動関数 $\psi_{n\ell m}(r,\theta,\phi) = R_{n\ell}(r)\Theta_{\ell m}(\theta)\Phi_m(\phi)$ を, 求め, 規格化せよ. 以下の公式が役に立つかもしれない.

$$\int d\theta \sin^3\theta = \frac{1}{12}\cos 3\theta - \frac{3}{4}\cos\theta, \quad \int_0^\infty dx\, \mathrm{e}^{-ax}x^\alpha = \frac{\Gamma(\alpha+1)}{a^{\alpha+1}}.$$

[9-2]　水素原子

$(n,\ell) = (2,0)$ について, 軌道の平均 2 乗半径 $\langle r^2\rangle$ を求めよ.

[9-3]　水素原子

$(n,\ell) = (1,0)$ について, ポテンシャルエネルギー, 運動エネルギーの期待値 $\langle U(r)\rangle, \langle -\mathbf{p}^2/2m\rangle$ を求めよ.

[9-4]　1 次元の井戸型ポテンシャル

質量 m の粒子が, 1 次元空間を, 幅 $2a$, 深さ U_0 の '井戸型' ポテンシャル

$$U(x) = \begin{cases} 0 & x < -a & \text{領域 I} \\ U_0(<0) & |x| < a & \text{領域 II} \\ 0 & x > +a & \text{領域 III} \end{cases} \tag{2}$$

のもとで運動している. 束縛状態のエネルギーを求めよ (注: エネルギーは超越関数を含んだ方程式の根として与えられるが, その方程式は解けないので, 方程式をできるだけ簡単化するだけでよい). 基底状態, いくつかの励起状態の波動関数の概要を示せ.

解き方が思いうかばない人は, 以下の手順に従ってもよい. 規格化は気にしなくてよい.

1. エネルギーを E とおき, 領域 I, II, III で, それぞれ Schrödinger 方程式を解け (それぞれ, 2 つの解の線型結合となる).
2. 領域 I, III で, $|x| \to \infty$ での境界条件を課せ (一方の解のの係数が 0 になる).
3. 点 $|x| = a$ で, 2 つの波動関数が正しく接続するという条件を課せ.

参考文献

[1] 中嶋, 吉岡, 例解 量子力学演習, 物理入門コース / 演習 3 (1991) 岩波書店.

[2] L. I. Schiff, *Quantum Mechanics*, 3rd edition, McGraw-Hill (1968).

[3] J. J. Sakurai, *Modern Quantum Mechanics*, Benjamin (1985)