量子力学 II 演習 問題 (第 11 回)

樋口 さぶろお*

1999 年 7 月 15 日

お知らせ

- この演習の評価は, 毎週の提出物で行ないます. 試験はありません.
- 今回の演習のレポートは 7 月 19 日まで受け付けます. すでに解答を配ってしまった前回以前の問題については成績には算入しません.
- 7 月 21 日までに成績に関する掲示を行ないます.
- 成績についての疑問, 質問, 相談は 8 月 5 日までにお願いします. (時間がない場合には, とりあえず疑問 etc. があることを連絡して下さい)
- 樋口は 7 月 26 日 (月)-30 日 (金) は不在です.
- 今回の演習の答案と解答は, 7 月 21 日以降に, 16-809B の前のポストから各自とっていって下さい. ただし, 9 月以降は処分してしまうかもしれません.

*hig@rice.c.u-tokyo.ac.jp, URL: http://rice.c.u-tokyo.ac.jp/~hig/, へや: 駒場 16 号館 809B, でんわ: (03)5454.6735

水素原子

Bohr 半径を $a_0 = 4\pi\epsilon_0\hbar^2/e^2 m_\mathrm{e}$ とするとき, 水素原子中の電子のエネルギー固有状態

$$\psi_{n\ell m}(r,\theta,\phi) = R_{n\ell}(r)\Theta_{\ell m}(\theta)\Phi_m(\phi)$$

は主量子数 n, 方位量子数 ℓ, 磁気量子数 m で特徴づけられる. ただし $n \geq \ell+1, \ell \geq 0, -\ell \leq m \leq \ell$. ここで, スピンは無視した. 上の波動関数それぞれに, 上向き, 下向きのスピン波動関数との積を考えることができる. なお,

$$\begin{aligned}
&\Phi_m(\phi) = (2\pi)^{-1/2}\mathrm{e}^{im\phi},\\
&\Theta_{00}(\theta) = 2^{-1/2}, \quad \Theta_{10}(\theta) = (3/2)^{1/2}\cos\theta, \quad \Theta_{1,\pm1}(\theta) = \mp(3/4)^{1/2}\sin\theta,\\
&R_{10}(r) = \frac{2}{a_0^{3/2}}\mathrm{e}^{-r/a_0}, R_{20}(r) = \frac{1}{\sqrt{2}a_0^{3/2}}\left(1-\frac{r}{2a_0}\right)\mathrm{e}^{-r/2a_0},\\
&R_{21}(r) = \frac{1}{2\sqrt{6}a_0^{3/2}}\frac{r}{a_0}\mathrm{e}^{-r/2a_0}
\end{aligned}$$

など. エネルギーは n のみに依存し,

$$E_n = -\frac{m_\mathrm{e}e^4}{32\pi^2\epsilon_0^2\hbar^2 n^2} \tag{1}$$

動径方向の積分に有用な公式として

$$\int_0^\infty dx\,\mathrm{e}^{-ax}x^\alpha = \frac{\Gamma(\alpha+1)}{a^{\alpha+1}}.$$

[11-Q1] 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.

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

[11-Q2] 水素原子

$(n,\ell) = (2,1)$ について, 軌道の平均 2 乗半径 $\langle r^2\rangle$ を求めよ.

[11-Q3]　水素原子

$(n,\ell,m)=(2,1,1)$ に対して, 期待値 $\langle z\rangle,\langle z^2\rangle$ を求めよ.

[11-Q4]　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$\langle U(r)\rangle,\langle \mathbf{p}^2/2m_{\mathrm{e}}\rangle$ を求めよ.

[11-Q5]　角運動量の合成

2 つの角運動量 $\mathbf{S}_i=(S_{ix},S_{iy},S_{iz})$ $(i=1,2)$ がある. $\mathbf{S}_i^2$ と S_{iz} の同時固有状態を $v_{i\pm}$ とする. $\mathbf{S}^2$ の固有値が $\frac{1}{2}(\frac{1}{2}+1)\hbar^2$ であるような固有空間に限って考える.

$$\mathbf{S}_i^2 v_{i\pm} = \frac{1}{2}\left(1+\frac{1}{2}\right)\hbar^2 v_{i\pm} \tag{2}$$

$$S_{iz} v_{i\pm} = \pm\frac{\hbar}{2} v_{i\pm} \tag{3}$$

とする (いわば, $v_\pm\equiv\psi_{j=\frac{1}{2}\ m=\pm\frac{1}{2}}$). 演算子 $\mathbf{S}=(S_x,S_y,S_z)$ を $\mathbf{S}=\mathbf{S}_1+\mathbf{S}_2$ と定義する. (より正確には $\mathbf{S}=\mathbf{S}_1\otimes\mathbf{1}+\mathbf{1}\otimes\mathbf{S}_2$ と書いた方がいいかもしれない.)

1. 状態 $v_{1\pm}v_{2\pm}$ (複号同順でない) のうち, $\mathbf{S}^2, S_z$ の同時固有関数であるものはどれか. 式

$$2\mathbf{S}_1\cdot\mathbf{S}_2 = S_{1+}S_{2-}+S_{1-}S_{2+}+2S_{1z}S_{2z} \tag{4}$$

   が有用かもしれない ($S_\pm := S_x\pm\sqrt{-1}S_y$).
2. 上の spin 波動関数の適当な線形結合をとって, $\mathbf{S}^2, S_z$ の同時固有関数を作れ.
3. それらの状態のうち, 粒子の交換について対称, 反対称であるものはそれぞれどれか.