量子力学 II 演習 問題 (第 8回)

樋口 さぶろお*

1998 年 6 月 10 日

水素原子

Bohr 半径を $a_0 = 4\pi\epsilon_0\hbar^2/e^2 m$ 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,

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

など. エネルギーは n のみに依存し,

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

動径方向の積分に有用な公式として

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

*`hig@rice.c.u-tokyo.ac.jp`, URL: `http://rice.c.u-tokyo.ac.jp/~hig/`, Room: Komaba 16-809B, Phone: (03)54.54.67.35

[8-1]　中心力場

中心力ポテンシャル $U(r)$ のもとで 3 次元空間を運動する, 質量 m の粒子の量子力学を考える.

1. (時間に依存しない) Schrödinger 方程式をかけ.
2. 極座標 (r,θ,ϕ) をとったとき, 波動関数$\Psi(r,\theta,\phi)$ が$\Psi(r,\theta,\phi)=R(r)\Theta(\theta)\Phi(\phi)$ と変数分離されるとする. $R(r)$, $\Theta(\theta)$, $\Phi(\phi)$ の満たす方程式をかけ (hint: 方位量子数, 磁気量子数にあたる新しい定数が 2 つ現れる). ただし, $\mathbf{L}^2$ は全角運動量演算子

$$\mathbf{L}^2=-\hbar^2\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right]$$

とすると Laplacian の極座標表示は次の通り.

$$\nabla^2=\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)-\frac{1}{\hbar^2r^2}\mathbf{L}^2$$

3. $\chi(r):=R(r)r$ と定義すると, $\chi(r)$ は, ポテンシャル

$$V_\ell(r)=U(r)+\frac{\hbar^2}{2mr^2}\ell(\ell+1)$$

のもとで 1 次元空間を運動する粒子の波動関数であることを示せ.

[8-2]　水素原子

$(n,\ell,m))=(2,0,0),(2,1,m)$ について, 軌道の平均 2 乗半径 $\langle r^2\rangle$ を求めよ.

[8-3]　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.

[8-4]　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.