量子力学 II　演習問題 8

2017 年 6 月 16 日

1．3 次元球対称井戸型ポテンシャル

3 次元空間で、球対称な井戸型ポテンシャル中の束縛状態を考える。ハミルトニアンは、

$$\hat{H} = \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m} + V(\hat{r})$$

で、ポテンシャルは

$$V(r) = \begin{cases} 0 & (0 < r < a) \\ \infty & (a \leq r) \end{cases}$$

である（$a > 0$）。

(1)　エネルギー E と軌道角運動量が l が与えられたとき、波動関数を $\psi(\mathbf{r}) = R(r)\, Y_l^m(\theta, \phi)$ と書くと、動径方向の波動関数が

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{d}{dr} - \frac{l(l+1)}{r^2} + \frac{2m(E - V(r))}{\hbar^2}\right] R(r) = 0$$

を満たすことを示せ。

(2)　前問で得られた微分方程式の $0 < r < a$ の場合について、適当に変数変換すると Bessel の微分方程式に帰着することを示せ。

(3)　境界条件から、エネルギースペクトルを求めよ（そのさい、Bessel 関数のゼロ点を用いよ）。また、Bessel 関数のゼロ点の数値を調べ、$l = 0,\, 1,\, 2,\, 3$ の場合について小さなものから適当なところまで固有エネルギーを数値的に求めて、スペクトルを図示せよ。

2．ビリアル定理

(1)　水素原子のハミルトニアン

$$\hat{H} = \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m} - \frac{k}{\hat{r}}$$

に対して、交換子 $\left[\hat{H}, \hat{\vec{p}} \cdot \hat{\vec{r}}\right]$ を計算せよ。

(2)　エネルギー固有状態を $|n\rangle$ と表したとき $(\hat{H}|n\rangle = E_n |n\rangle,\, E_n = -mk^2/2\hbar^2 n^2)$、$|n\rangle$ における期待値に対して

$$2\langle n| \left(\frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m}\right) |n\rangle = \langle n| \left(\frac{k}{\hat{r}}\right) |n\rangle$$

という関係が成り立つことを示せ（ビリアル定理）。

(3)　前問のビリアル定理を用いて、エネルギー固有状態における期待値 $\langle n| (1/\hat{r}) |n\rangle$ を計算せよ。

3．水素原子

水素原子のスペクトルを代数的に導出しよう。ポテンシャルは

$$V(r) = -\frac{k}{r}$$

で $(k>0)$、束縛状態を考えるものとする。このとき、Runge-Lenz ベクトルを

$$\hat{\vec{R}} := -\frac{k\hat{\vec{x}}}{\hat{r}} + \frac{1}{2m}\left(\hat{\vec{p}}\times\hat{\vec{L}} - \hat{\vec{L}}\times\hat{\vec{p}}\right)$$

によって定義する。

(1) 対応する古典問題 (Kepler 問題) において、Runge-Lenz ベクトルが保存することを Newton の運動方程式にもとづいて確認せよ。また、Kepler 問題において Runge-Lenz ベクトルの保存はどのような物理的帰結をもたらすか説明せよ。

(2) Runge-Lenz ベクトルがハミルトニアンと交換すること

$$\left[\hat{R}_x,\, \hat{H}\right] = \left[\hat{R}_y,\, \hat{H}\right] = \left[\hat{R}_z,\, \hat{H}\right] = 0$$

を示せ。

以下ではエネルギー $E<0$ の固有状態を考え、

$$\hat{\vec{K}} := \sqrt{\frac{m}{-2E}}\,\hat{\vec{R}}$$

として、規格化した Runge-Lenz ベクトル $\hat{\vec{K}}$ を用いる。

(3) $\hat{\vec{L}}$ と $\hat{\vec{K}}$ のあいだに、

$$\hat{\vec{L}}^2 + \hat{\vec{K}}^2 = \left(\frac{mk^2}{-2E} - \hbar^2\right)\hat{I}, \quad \hat{\vec{L}}\cdot\hat{\vec{K}} = 0$$

という関係があることを示せ。

(4) $\hat{\vec{L}}$ と $\hat{\vec{K}}$ についての交換関係

$$\left[\hat{L}_i,\, \hat{L}_j\right] = \mathrm{i}\hbar\sum_{k=x,y,z}\varepsilon_{ijk}\hat{L}_k, \quad \left[\hat{L}_i,\, \hat{K}_j\right] = \mathrm{i}\hbar\sum_{k=x,y,z}\varepsilon_{ijk}\hat{K}_k, \quad \left[\hat{K}_i,\, \hat{K}_j\right] = \mathrm{i}\hbar\sum_{k=x,y,z}\varepsilon_{ijk}\hat{L}_k$$

を示せ。

(5) 演算子 $\hat{\vec{M}}$ と $\hat{\vec{N}}$ を

$$\hat{\vec{M}} := \frac{1}{2}\left(\hat{\vec{L}} + \hat{\vec{K}}\right),\ \hat{\vec{N}} := \frac{1}{2}\left(\hat{\vec{L}} - \hat{\vec{K}}\right)$$

と定義する。このとき、

$$\hat{\vec{M}}^2 = \hat{\vec{N}}^2 = \frac{1}{4}\left(\frac{mk^2}{-2E} - \hbar^2\right)\hat{I}$$

かつ

$$\left[\hat{M}_i,\, \hat{M}_j\right] = \mathrm{i}\hbar \sum_{k=x,y,z} \varepsilon_{ijk} \hat{M}_k, \quad \left[\hat{N}_i,\, \hat{N}_j\right] = \mathrm{i}\hbar \sum_{k=x,y,z} \varepsilon_{ijk} \hat{N}_k, \quad \left[\hat{M}_i,\, \hat{N}_j\right] = 0$$

が成り立つことを示せ。

設問 (5) の結果は、$\hat{\vec{M}}$ と $\hat{\vec{N}}$ が大きさの等しい独立な角運動量演算子として振る舞うことを示唆する。したがって、

$$\hat{\vec{M}}^2 = \hat{\vec{N}}^2 = j\,(j+1)\,\hbar^2\,\hat{I}$$

と表せる $(j = 0,\, 1/2,\, 1,\, 3/2, \cdots)$。

(6) 上記のことを踏まえて、水素原子のエネルギースペクトル

$$E_n = -\frac{mk^2}{2\hbar^2 n^2} \qquad (n = 0,\, 1,\, 2,\, 3, \cdots)$$

を導出せよ。また、エネルギー準位の縮退度を求めよ。

(7) エネルギー E_n の固有状態について、全角運動量のとりうる値を求めよ。