量子力学 II　演習問題 7

2018 年 5 月 26 日

1　極座標におけるハミルトニアンの量子化

　講義ノートにおいては、運動量演算子が座標表示の波動関数に対して微分演算子として作用することを仮定して、次の式 (講義ノートでは式 (7.6)) を導いた。

$$\Delta = \frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}r - \frac{\hat{\vec{\mathbf{L}}}^2}{\hbar^2 r^2}$$

ここでは、この等式の第 1 項の物理的意味を考察しよう。3 次元空間を運動する質量 m の自由粒子を考えるが、この問題においては、まずは古典的ハミルトニアンから出発してから量子化する。古典的な位置ベクトル、運動量ベクトル、ハミルトニアンをそれぞれ $\vec{\mathbf{r}}_{cl}, \vec{\mathbf{p}}_{cl}, H_{cl} := \frac{1}{2m}\vec{\mathbf{p}}_{cl}^2$ とする。

(1) 古典的な 3 次元ベクトル $\vec{\mathbf{A}}$ と $\vec{\mathbf{B}}$ について、次の恒等式を示せ。

$$\left(\vec{\mathbf{A}} \times \vec{\mathbf{B}}\right)^2 = \vec{\mathbf{A}}^2\vec{\mathbf{B}}^2 - \left(\vec{\mathbf{A}} \cdot \vec{\mathbf{B}}\right)^2$$

(2) ここで、古典的角運動量 $\vec{\mathbf{L}}_{cl} := \vec{\mathbf{r}}_{cl} \times \vec{\mathbf{p}}_{cl}$ を導入する。(1) で示した恒等式を用いて次の等式を示せ。

$$H_{cl} = \frac{p_{r,cl}^2}{2m} + \frac{\vec{\mathbf{L}}_{cl}^2}{2mr_{cl}^2}$$

ただし、$r_{cl} := |\vec{\mathbf{r}}_{cl}|$ であり、$p_{r,cl} := \frac{1}{r_{cl}}\vec{\mathbf{r}}_{cl} \cdot \vec{\mathbf{p}}_{cl}$ は古典的運動量の動径方向への射影である。

　次に、(2) で示した等式の量子化を考える。$\vec{\mathbf{r}}_{cl} \to \hat{\vec{\mathbf{r}}} = \vec{\mathbf{r}}$, $\vec{\mathbf{p}}_{cl} \to \hat{\vec{\mathbf{p}}} = -\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{\nabla}$ と置き換えた場合、(2) で示した等式の右辺第 2 項はエルミートになるが、右辺第 1 項の p_r はエルミートにならない。それでは、p_r をどのように量子化すればエルミートになるかを考えよう。

(3) n 次元一般化座標 $\hat{q}_i (i = 1 \cdots n)$ とそれに共役な運動量 $\hat{p}_i$ が交換関係 $[\hat{q}_i, \hat{p}_j] = \mathrm{i}\hbar\delta_{i,j}$ を満たし、波動関数 $\psi(\vec{\mathbf{q}}) := \langle\vec{\mathbf{q}}|\psi\rangle$ と $\phi(\vec{\mathbf{q}})$ の内積が正の実関数 $f(\vec{\mathbf{q}})$ を用いて次のように与えられているとする。

$$(\psi, \phi) = \int f(\vec{\mathbf{q}})\psi^*(\vec{\mathbf{q}})\phi(\vec{\mathbf{q}})\,\mathrm{d}^n q$$

このとき、次のように与えられる $\hat{p}_i$ がエルミートとなるような実数値関数 $F_i(\vec{\mathbf{q}})$ を求めよ。

$$\hat{p}_i\psi(\vec{\mathbf{q}}) := \langle\vec{\mathbf{q}}|\hat{p}_i|\psi\rangle = -\mathrm{i}\hbar\left(\frac{\partial}{\partial q_i} + F_i(\vec{\mathbf{q}})\right)\psi(\vec{\mathbf{q}})$$

(4) r, θ, ϕ からなる 3 次元極座標において、$p_{r,cl}$ は動径座標 r に共役な運動量である。次のように与えられる $\hat{p}_r$ が $p_{r,cl}$ のエルミートな量子化になっていることを、(3) の結果を用いて示せ。

$$\hat{p}_r\psi(r,\theta,\phi) = \left(-\mathrm{i}\hbar\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}r\right)\psi(r,\theta,\phi)$$

この結果から、ラプラシアンの第 1 項は $\hat{p}_r^2$ に対応していることがわかる。

2　2 次元極座標におけるシュレディンガー方程式

質量 m の自由粒子の 2 次元空間における運動を極座標を用いて考えよう。2 次元極座標は変数 r, θ によって表され、デカルト座標との対応関係は $x = r\cos\theta, y = r\sin\theta$ である。

(1) 極座標において、固有エネルギー E を持つ定常状態の波動関数 $\psi(r,\theta)$ が次のシュレディンガー方程式を満たすことを示せ。

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}\right)\psi(r,\theta) = E\psi(r,\theta)$$

ここで、2 次元空間における角運動量 $\hat{p}_\theta := -\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial\theta}$ を定義すると、ハミルトニアンは $\hat{p}_\theta$ と交換するから、$\psi(r,\theta)$ として $\hat{H}$ と $\hat{p}_\theta$ の同時固有関数を取ることができる。

(2) $\hat{p}_\theta$ の固有関数 $\psi(r,\theta)$ が、l を整数として以下の形で与えられることを示せ。

$$\psi(r,\theta) = R(r)\mathrm{e}^{\mathrm{i}l\theta}$$

(3) $\hat{H}$ と $\hat{p}_\theta$ の同時固有関数 $\psi(r,\theta) = R(r)\mathrm{e}^{\mathrm{i}l\theta}$ について、長さの次元を持つパラメータ $\alpha := \frac{\hbar}{\sqrt{2mE}}$ を導入して $r = \alpha\xi$ という形で無次元化すると、$\tilde{R}(\xi) := R(r)$ が次の方程式を満たすことを示せ。(この方程式を Bessel の微

分方程式という。)

$$\left(\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\xi^2}+\frac{1}{\xi}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\right)\tilde{R}(\xi)+\left(1-\frac{l^2}{\xi^2}\right)\tilde{R}(\xi)=0$$

以下では、境界条件 $\psi(r_0,\theta)=0$ $(r_0>0)$ のもとでの定常状態を考える。

(4) (3) で示した方程式の解のうち原点で正則なものは第 1 種 Bessel 関数 $J_l(\xi)$ と呼ばれる。$J_l(\xi)$ の原点を除く零点を小さい順に並べたときに m 番目のものを $Z_{l,m}$ と表記するとき、エネルギー固有関数と固有値の組を、$Z_{l,m}$ を用いて表せ。なお、固有関数の規格化は考えなくてよい。

3 Kramers の漸化式

以下のような水素原子型ハミルトニアンを持つ電子の 3 次元空間における運動を考える。

$$\hat{H}=\frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m}-\frac{Ze^2}{r}$$

ここで、m,Z,e,r はそれぞれ電子の質量、原子核の陽子数、素電荷、電子の原子中心からの距離である。このハミルトニアンの規格化された固有関数および対応する固有エネルギーはそれぞれ次のように与えられる。

$$\psi_{nlm}(r,\theta,\phi)=R_{nl}(r)Y_l^m(\theta,\phi),\ E_n=-\frac{Z^2e^2}{2a_0n^2}$$

ここで、a_0 は Bohr 半径 $a_0=\frac{\hbar^2}{me^2}$ である。また、以下では、状態 $\psi_{nlm}(r,\theta,\phi)$ における物理量 O の期待値を $\langle O\rangle$ と表す。

(1) $k>-(2l+1)$ のとき、次の漸化式 (Kramers の漸化式) を示せ。

$$Z^2\left(\frac{k+1}{n^2}\right)\left\langle r^k\right\rangle-Z(2k+1)a_0\left\langle r^{k-1}\right\rangle+\frac{k}{4}\left[(2l+1)^2-k^2\right]a_0^2\left\langle r^{k-2}\right\rangle=0$$

ヒント:$\chi(r):=rR_{nl}(r)$ を導入して、次の積分 I の部分積分を考えよ。

$$I:=\int_0^\infty r^{k+1}\chi'(r)\chi''(r)\,\mathrm{d}r$$

(2) Kramers の漸化式を用いて、$\langle 1/r\rangle, \langle r\rangle, \left\langle r^2\right\rangle$ の値をそれぞれ求め、n,l,Z,a_0 を用いて表せ。

(3) 特に $l=n-1$ のとき、$\Delta r:=\sqrt{\left\langle r^2\right\rangle-\langle r\rangle^2}$ の値を求め、n,Z,a_0 を用いて表せ。