

(復習) 3次元のシュレディンガー方程式:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(r) - E\right)\psi(r) = 0$$

極座標表示:

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

\hat{L}^2 の固有値, 固有状態:

$$\hat{L}^2 Y_{lm}(\theta, \varphi) = l(l+1) Y_{lm}(\theta, \varphi)$$

角運動量
の 2 乗

$$(\hat{L}_z Y_{lm}(\theta, \varphi) = m Y_{lm}(\theta, \varphi))$$

球面調和関数

3. 動径波動関数

3.1. 動径波動関数の従う方程式

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\hat{l}^2 \hbar^2}{2mr^2} + V(r) - E \right] \psi(r) = 0$$

$$\psi(r) = R_l(r) Y_{lm}(\hat{r}) \quad \text{とあくと}$$

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

$$\text{更に} \quad R_l(r) = \frac{u_l(r)}{r} \quad \text{とあくと}$$

$$R_l' = \frac{u_l'}{r} - \frac{u_l}{r^2}$$

$$\Rightarrow r^2 R_l' = r u_l' - u_l$$

$$\Rightarrow \frac{1}{r^2} (r^2 R_l')' = \frac{1}{r^2} (u_l' + r u_l'' - u_l') = \frac{1}{r} u_l''$$

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

↔ ポテンシャルが
 $V(r) \rightarrow V(r) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2}$ としたときの
 遠くポテンシャル
 1次元シュレ-ディンガー方程式と同じ形。

(note) 1次元シュレ-ディンガー方程式:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) - E \right) \psi(x) = 0$$

↑
 $m=lz$ には
 依らない
 ↑
 l と m は
 m に依らない

• 波動関数の規格化

(note) $dr = r^2 dr \hat{d}\hat{r}$ ← $\sin\theta d\varphi$

$$1 = \int_0^\infty r^2 dr \int d\hat{r} |\psi(r)|^2$$

$$= \int_0^\infty r^2 dr |R_l(r)|^2 \underbrace{\int d\hat{r} |Y_{lm}(\hat{r})|^2}_1$$

$$\Rightarrow \int_0^\infty r^2 dr |R_l(r)|^2 = 1$$

$$\parallel$$

$$\int_0^\infty dr |u_l(r)|^2$$

• 原点付近での振る舞い

(KKL $\lim_{r \rightarrow 0} r^2 V(r) = 0$ とする)

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

$r \sim 0$ では

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} \right) u_l(r) \sim 0$$

$u_l(r) = r^k$ とおいて代入

$$\downarrow$$

$$\left(-k(k-1) + l(l+1) \right) r^{k-2} \sim 0$$

$$\Downarrow \quad l(l+1) = k(k-1)$$

$$\Downarrow \quad k = l+1, -l$$

$$k = l+1 \quad \rightarrow \quad U_l(r) \sim r^{l+1}$$

$$R_l(r) \sim r^l \quad : \quad \text{原点で正則}$$

(note) $U_l(0) = 0$

$$k = -l \quad \rightarrow \quad U_l(r) \sim r^{-l}$$

$$R_l(r) \sim r^{-l-1} \quad : \quad \text{原点で発散}$$

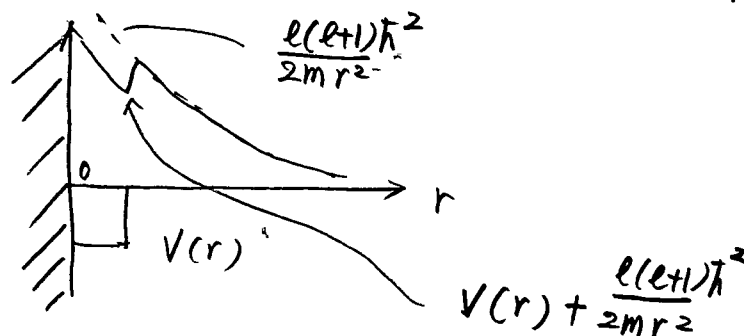
↑
非物理的
な解
↑
棄却

↓

$U_l(r)$ に対してはポテンシャルが

$$V(r) \rightarrow \begin{cases} V(r) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} & (r > 0) \\ \infty & (r < 0) \end{cases}$$

となり、 $r > 0$ 時の 1次元シュレディンガー方程式と同じ。



3.2. 自由粒子の解

$$V(r) = 0$$

$$\downarrow \left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R_l(r) + k^2 R_l(r) = 0$$

\uparrow
 $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$

○ $\rho = kr$ とおくと

$$\frac{d}{dr} = k \frac{d}{d\rho}, \quad \frac{d^2}{dr^2} = k^2 \frac{d^2}{d\rho^2}$$

$$\downarrow \left(\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{d}{d\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} + 1 \right) R_l(\rho) = 0$$

解: 球ハッセル関数 $j_l(\rho)$
及ビ球ノイマン関数 $n_l(\rho)$

○ 定義: $j_l(\rho) = (-\rho)^l \left(\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \right)^l \left(\frac{\sin \rho}{\rho} \right)$

$$n_l(\rho) = -(-\rho)^l \left(\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \right)^l \left(\frac{\cos \rho}{\rho} \right)$$

例) $j_0(\rho) = \frac{\sin \rho}{\rho}, \quad n_0(\rho) = -\frac{\cos \rho}{\rho}$

$$j_1(\rho) = \frac{\sin \rho}{\rho^2} - \frac{\cos \rho}{\rho}$$

$$n_1(\rho) = -\frac{\cos \rho}{\rho^2} - \frac{\sin \rho}{\rho} \quad \text{etc.}$$

漸近形

✓ $\rho \ll l$ 区

$$j_l(\rho) \sim \frac{\rho^l}{(2l+1)!!}$$

$$n_l(\rho) \sim -\frac{(2l-1)!!}{\rho^{l+1}}$$

⇨ $n_l(\rho)$ は原点で発散
(非物理的解)

KKL $\rho \geq l$ では OK

✓ $\rho \gg l$ 区

$$j_l(\rho) \sim \frac{1}{\rho} \sin\left(\rho - \frac{l\pi}{2}\right)$$

$$n_l(\rho) \sim -\frac{1}{\rho} \cos\left(\rho - \frac{l\pi}{2}\right)$$

(note) 自由粒子の解:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \frac{k^2 \hbar^2}{2m}\right) \psi(r) = 0$$

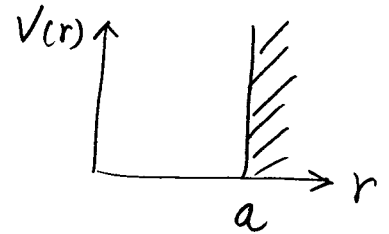
$$\rightarrow \psi(r) = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}$$

これは球ハルセル関数とルジャンドル関数
を用いて書くことができる:

$$e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} = e^{ikr \cos\theta} = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l j_l(kr) \underbrace{P_l(\cos\theta)}_{\sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}} Y_{l0}(\theta)}$$

3.3. 無限に高い球対称井戸

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



$r < a$ は自由粒子と同じ

→ 原点, $r=0$ で正則な解は

$$R_l(r) = A_l \cdot j_l(kr)$$

↑

規格化因子

$r > a$ で $V(r) = \infty$

↓

$$R_l(r=a) = 0$$

→ $j_l(ka) = 0$ を満たす ka のみが可能。

例) $l=0$ のとき

$$j_0(ka) = \frac{1}{ka} \sin(ka) = 0$$

$$\rightarrow ka = n\pi$$

$$\rightarrow E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2}$$

* 1次元ポテンシャル

$$V(x) = \begin{cases} 0 & (0 \leq x \leq a) \\ \infty & (\text{それ以外}) \end{cases}$$

と同じ

3.4. 井戸型ポテンシャル ($E < 0$ の場合)

$$V(r) = \begin{cases} -V_0 & r \leq a \\ 0 & r > a \end{cases}$$

簡単のため $l=0$ に限ると

$$\begin{aligned} r < a \text{ では } & U_0(r) = A \sin(\tilde{k}r) \\ r > a \text{ では } & (-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} - E) U_0(r) = 0 \end{aligned}$$

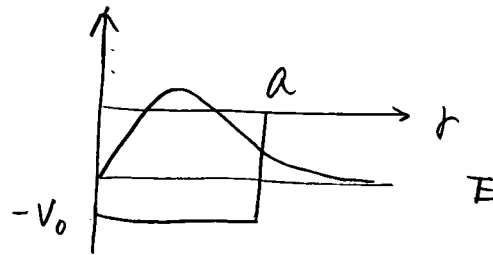
$E + V_0 = \frac{\tilde{k}^2 \hbar^2}{2m}$

↓

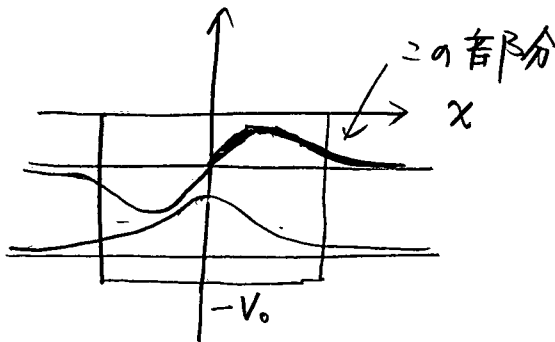
$$U_0(r) = B e^{-\kappa r}$$

(※ 一般の l では 球バessel関数 $j_l(\tilde{k}r) \cdot \tilde{k}r$ と 球ハミルトン関数 $h_l^{(\pm)}(kr) \cdot \kappa r$)
 $(E = -\frac{\kappa^2 \hbar^2}{2m})$

波動関数:



(note) この波動関数は 1次元井戸型ポテンシャルの励起状態の形に相当



↙ 3次元ポテンシャルは井戸がある程度深くないと束縛状態を持たない

↔ 1次元ポテンシャルと大きく違ふところ (1次元ポテンシャルは引力であれば必ず束縛状態を持つ)