

(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

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

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

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

更に $R_l(r) = \frac{u_l(r)}{r}$ とあ'くと

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

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

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

↑
m = l, z には
依らない
↑
l と l' は
m に依らない
(2l+1 個の状
態が縮退)

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

↔ 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
遠くがポテンシャル

1次元シュレ-ディンガー方程式と同じ形。

(ただし r < 0 はとれないので V(r) = +∞ (r ≤ 0) とする。)

(note) 1次元シュレ-ディンガー方程式:

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

↑
後で正当化
(u_l(0) = 0)

• 波動関数の規格化

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

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

$$= \int_0^\infty r^2 dr |R_\ell(r)|^2 \underbrace{\int d\hat{r} |Y_{\ell m}(\hat{r})|^2}_{=1}$$

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

$$\parallel$$

$$\int_0^\infty dr |u_\ell(r)|^2$$

• 原点付近での振る舞い

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

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

$r \sim 0$ では

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

$u_\ell(r) = r^k$ とおいて代入

↓

$$(-k(k-1) + \ell(\ell+1)) r^{k-2} \sim 0$$

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

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

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

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

(note) $U_l(0) = 0$

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

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

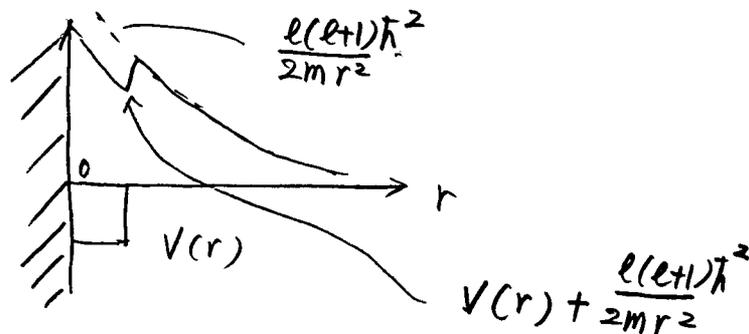
↑
非物理的
な解
↑
棄却

↓

$$U_l(r) \text{ に対し } r \text{ は } \text{"ボート" シェル "カ"}$$

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

となつた時の 1次元 シュレ-ディンガー 方程式' と同じ。



漸近形

✓ $\rho \ll l \quad \tau''$

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

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

⇓ $n_l(\rho)$ は原点で発散
(非物理的解)

↑
KKL $\rho \geq l$ では OK

✓ $\rho \gg l \quad \tau''$

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

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

(note) 自由粒子の解:

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

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

これは球ハルモニック関数とルジャンドル関数
を用いて書くことができる:

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

多重極展開

$$\frac{\sqrt{4\pi}}{\sqrt{2l+1}} Y_{l0}(\theta)$$

→ cf. 散乱問題

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

$$\rho = kr \quad \text{と おく}$$

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

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

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

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

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

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

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

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

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

→ 原点で正則な解は

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

↑
規格化因子

$r > a$ 区 $V(r) = \infty$

↓
 $R_l(r=a) = 0$

↓ $j_l(ka) = 0$ を満たす ka のみが可能。

例) $l=0$ のとき

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

↓ $ka = n\pi$

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

* 1次元ポテンシャル

$$V(x) = \begin{cases} 0 & (0 \leq x \leq a) \\ \infty & (\text{その他}) \end{cases}$$

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

$$r < a \text{ では } U_0(r) = A \sin(\tilde{k}r)$$

$$r > a \text{ では } U_0(r) = B e^{-kr} \quad E + V_0 = \frac{\tilde{k}^2 \hbar^2}{2m}$$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} - E \right) U_0(r) = 0$$

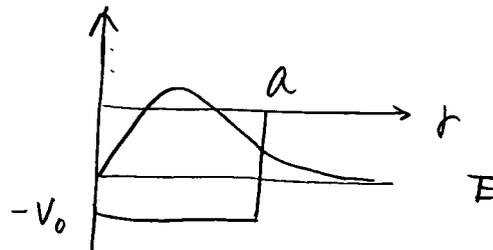
↓

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

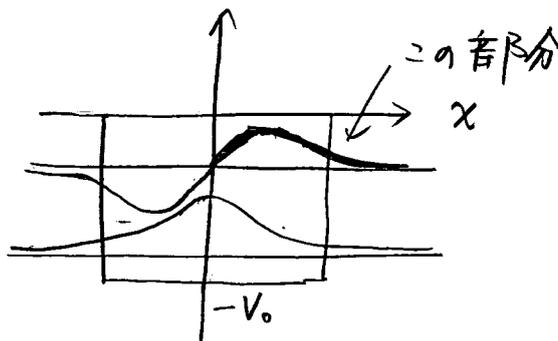
$$(E = -\frac{k^2 \hbar^2}{2m})$$

(※ 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 $h_l^{(\pm)}(ikr) \cdot kr$)

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)

cf. 重陽子: 陽子 (p) と中性子 (n) の束縛状態,
 p - n 間の引力 (核力) が強く束縛
状態を作る。

2 中性子 (nn) は束縛しない。 n - n 間にも
核力 (引力) がはたらくが束縛状態を作るほど
強くない。 2 陽子 (pp) も同様。