量子力学 II レポート問題 (6)

(出題 2007/07/02、〆切 2007/07/23 の授業まで)

Report 17. (球面波)

3 次元空間で質量 m の粒子が自由に運動する場合 (ポテンシャルがない場合) を考える。エネルギーを $E = \dfrac{\hbar^2 k^2}{2m}$ として波数 k を定義し、$kr = x$ とおくと動径波動関数は次の方程式に従う。

$$\frac{d^2}{dr^2}\chi_\ell - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2}\chi_\ell + k^2\chi_\ell = 0 \quad \to \quad \frac{d^2}{dx^2}\chi_\ell - \frac{\ell(\ell+1)}{x^2}\chi_\ell + \chi_\ell = 0$$

1. 原点での振る舞いから $\chi_\ell = x^{\ell+1}\, u_\ell$ とおく。u_ℓ が次の方程式を満たすことを示せ。
$$u_\ell'' + \frac{2(\ell+1)}{x}u_\ell' + u_\ell = 0 \quad \cdots (*)$$
2. $v(x) = u_\ell'(x)/x$ とおく。$v(x)$ が、 $(*)$ で $\ell \to \ell+1$ とした方程式を満たすことを示せ。

以上より $u_{\ell+1}(x) = -\left(\dfrac{1}{x}\dfrac{d}{dx}\right) u_\ell(x)$ 、 $u_\ell(x) = (-1)^\ell \left(\dfrac{1}{x}\dfrac{d}{dx}\right)^\ell u_0(x)$ である。χ_0 の従う方程式は $\chi_0'' = -\chi_0$ であるから、 $u_0(x) = \chi_0/x = (A\sin x + B\cos x)/x$ 。以上より、3 次元自由粒子の動径波動関数 (球面波) が、次のように与えられる。(後の議論のため $(-1)^\ell$ 倍してある。)

$$R_\ell(x) = \frac{\chi_\ell(x)}{x} = (-x)^\ell \left(\frac{1}{x}\frac{d}{dx}\right)^\ell \left(\frac{\chi_0(x)}{x}\right) \quad \left[\chi_0''(x) = -\chi_0(x)\right]$$

3. $\chi_0(x) = A\sin x + B\cos x$ にたいして、 $(-1)^\ell \left(\dfrac{d}{dx}\right)^\ell \chi_0(x) = \chi_0(x - \ell\pi/2)$ となることを示せ。

遠方では $1/x^n$ 部分を微分すると分母の次数が増えて小さくなるので、三角関数 (χ_0) 部分のみを ℓ 回微分する項が主要となる。これより、$R_\ell(x)$ の遠方での振舞が、 $R_\ell(x) \overset{x\to\infty}{\to} \dfrac{\chi_0(x - \ell\pi/2)}{x}$ となることが分かる。

Report 18. (級数展開によるシュレディンガー方程式の解法 — 水素原子)

3 次元クーロンポテンシャル中を運動する質量 m の粒子の定常状態波動関数を $\varphi(\boldsymbol{r}) = R_\ell(r)\,Y_{\ell m}(\Omega)$ とすると、動径波動関数 R_ℓ の従う方程式は次のように与えられる。

$$\frac{d^2R_\ell}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{dR_\ell}{dr} + \left[\frac{2mE}{\hbar^2} + \frac{2me^2}{\hbar^2}\frac{1}{r} - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2}\right] R_\ell = 0$$

1. $x = \alpha r$ とおいて、この方程式を次のように無次元化できる。α, λ を求めよ。
$$\frac{d^2R_\ell}{dx^2} + \frac{2}{x}\frac{dR_\ell}{dx} - \frac{\ell(\ell+1)}{x^2} R_\ell + \left(\frac{\lambda}{x} - \frac{1}{4}\right) R_\ell = 0$$
2. 遠方での境界条件と原点付近での条件を課して、$R_\ell(x) = x^\ell \exp(-x/2)L(x)$ とおく。$L(x)$ の従う方程式を導け。
3. $L(x) = \sum_k a_k\, x^k$ と級数展開する。係数 a_k の従う漸化式を求めよ。
4. 前問の漸化式が無限まで続くと、波動関数は $x \to \infty$ において発散する。ある整数 n_r において $a_{n_r+1} = 0$ となる条件を課して、エネルギー固有値を求めよ。
5. $n_r = 0$ の場合、x について規格化された波動関数 $R_{n\ell}(x)$ を求めよ。(この場合、x についての規格化は $\int_0^\infty dx x^2 |R_{nl}(x)|^2 = 1$ で与えられる。また、$n = n_r + l + 1$ と与えるとする。今の場合は $n = \ell + 1$ である。)
6. $(n_r, \ell) = (1, 0)$ の場合に、r について規格化された波動関数 $R_{20}(r)$ を求めよ。