量子力学演習第二　第5回

担当：横山（本館 296）

2014 年 5 月 9 日

問題 1　《水素原子の基底状態、動径方向の運動量演算子》
(i) 水素原子の基底状態について大まかな見積もりをしてみる。不確定性関係から運動量は $p \sim \frac{\hbar}{r}$ 程度であるとする。このときエネルギーは以下のように見積もられる。

$$E = \frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2} - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}. \tag{1}$$

このエネルギー E を最小にする r を求め、このときのエネルギーを計算し、Bohr 半径と厳密に計算した基底状態のエネルギーと比較せよ。
(ii) 動径方向の運動量演算子を $p_r = -i\hbar\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}r$ と定義するとき、この演算子がエルミートであることを確かめ、以下の式が成り立つことを示せ。

$$[r, p_r] = i\hbar,\ (p_r)^2 = -\frac{\hbar^2}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}r = -\frac{\hbar^2}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r}. \tag{2}$$

問題 2　《水素原子の基底状態》
水素原子の基底状態について (i) r^n の期待値（n は整数）、(ii) 運動エネルギーとポテンシャルエネルギーの期待値、(iii) 水素原子による有効静電ポテンシャル（電子分布も含めて Poisson 方程式を解く）、を求めよ。

問題 3　《3 次元の束縛状態》
$l = 0$ の状態について Schrödinger 方程式を解き以下のポテンシャルに束縛された粒子の動径方向の波動関数とエネルギーを求めよ（結果は Airy 関数を用いて表現される）。k は実数とする。

$$V = kr. \tag{3}$$

（裏に続く）

問題 4《磁場中の水素原子》
z 方向に一様な磁場 B がかかっているときの水素原子を考える。ベクトルポテンシャルを $\mathbf{A} = \frac{1}{2}(\mathbf{B} \times \mathbf{r})$ と選ぶ。ベクトルポテンシャルが小さいとして、次のように近似する：$(\mathbf{p} + e\mathbf{A})^2 = \mathbf{p}^2 + e\mathbf{p} \cdot \mathbf{A} + e\mathbf{A} \cdot \mathbf{p}$. このとき次の式が成り立つことを示せ。

$$\frac{1}{2M}(\mathbf{p} + e\mathbf{A})^2 = \frac{\mathbf{p}^2}{2M} + \frac{e}{2M}BL_z. \tag{4}$$

磁場がないときの水素原子の結果を援用してエネルギー固有値を求めよ。また、2p 軌道のエネルギー準位を描き、磁場によってどのように変化するか説明せよ。

問題 5 《補充問題（水素分子）》
2 個の水素原子からなる水素分子のプラスイオンを考える。2 個の水素原子が $\mathbf{r}_a$, $\mathbf{r}_b$ にあるとすると、ハミルトニアンは以下のようになる。

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 |\mathbf{r} - \mathbf{r}_a|} - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 |\mathbf{r} - \mathbf{r}_b|}. \tag{5}$$

この問題を以下のように近似的に解く。系の波動関数を 1 個の水素原子に対する 1s 軌道の波動関数 u の重ねあわせで近似する：

$$\psi = c_1 u(\mathbf{r} - \mathbf{r}_a) + c_2 u(\mathbf{r} - \mathbf{r}_b). \tag{6}$$

このとき Schrödinger 方程式 $H\psi = E\psi$ の両辺に $u(\mathbf{r} - \mathbf{r}_a)$, $u(\mathbf{r} - \mathbf{r}_b)$ をかけて空間積分することにより、c_1, c_2 についての永年方程式を導き、それを解くことでこの系のエネルギーと固有関数を求めよ。

問題 6 《補充問題（エルミート演算子）》
一般座標 q とそれに共役な運動量 p の間に交換関係 $[q, p] = i\hbar$ があるとき、関数 $\psi(q)$、$\varphi(q)$ の内積を重み $f(q)$ を用いて以下のように表せるとする：

$$(\psi, \varphi) \equiv \int f(q)\psi^*(q)\varphi(q)dq. \tag{7}$$

このとき以下の運動量演算子がエルミートになるように $F(q)$ を関数を与えよ

$$p = -i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial q} + F(q)\right). \tag{8}$$

（以上）