演習問題

2024 年 6 月 20 日　　学籍番号 ＿＿＿＿＿＿＿＿　　氏名 ＿＿＿＿＿＿＿＿

[問 1]

(1)　水素原子の動径方向の Schrödinger 方程式

$$\frac{d^2}{dr^2}R(r)+\frac{2}{r}\frac{d}{dr}R(r)-\left[\frac{2m_e(V(r)-E)}{\hbar^2}+\frac{l(l+1)}{r^2}\right]R(r)=0, \qquad V(r)=-\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\frac{1}{r},$$

において $u(r):=rR(r)$ とすることで

$$\frac{d^2}{d\rho^2}u(\rho)=\left[1-\frac{\rho_0}{\rho}+\frac{l(l+1)}{\rho^2}\right]u(\rho), \qquad \kappa:=\frac{\sqrt{-2m_eE}}{\hbar}, \qquad \rho_0:=\frac{m_e e^2}{2\pi\epsilon_0\hbar^2\kappa}, \qquad \rho:=\kappa r,$$

が得られることを示せ。ただしエネルギーの範囲は $E<0$ とする。また $u(\rho)$ は $u(r(\rho))$ の略記である。

(2)　(1) の結果に

$$u(\rho)=\rho^{l+1}e^{-\rho}v(\rho),$$

を代入することで、$v(\rho)$ の満たすべき微分方程式

$$\frac{d^2}{d\rho^2}v(\rho)+\frac{2(l+1-\rho)}{\rho}\frac{d}{d\rho}v(\rho)+\frac{\rho_0-2(l+1)}{\rho}v(\rho)=0,$$

を導け。

(3)　$v(\rho)$ を

$$v(\rho)=\sum_{j=0}^{\infty}c_j\rho^j,$$

と多項式展開することで、漸化式

$$c_{j+1}=\frac{2(j+l+1)-\rho_0}{(j+1)(j+2l+2)}c_j \qquad (j=0,1,2,\cdots),$$

を導け。また、この漸化式の右辺がある $j=N-1(\geq 0)$ で 0 となるという、波動関数が発散しないための条件から、ρ_0, κ, E の量子化条件

$$\rho_0=2n, \qquad \kappa=\frac{m_e e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar^2}\frac{1}{n}, \qquad E=-\frac{m_e}{2\hbar^2}\left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\right)^2\frac{1}{n^2},$$

を導け。ここで $n:=N+l$ である。

(4)　水素原子における電子の典型的な広がりを与える定数である Bohr 半径

$$a=\frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{m_e e^2},$$

を、単位を m として有効数字 2 桁で計算せよ。これは $n=1$ のときの $1/\kappa$ に相当する。計算の際は、微細構造定数

$$\alpha:=\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar c}\simeq\frac{1}{137},$$

電子の質量 (を光速 c を用いてエネルギーに換算した)

$$m_e c^2 \simeq 511\,\mathrm{keV} = 5.11 \times 10^5\,\mathrm{eV},$$

電子ボルト eV とジュール J の変換則

$$1\,\mathrm{eV} \simeq 1.602 \times 10^{-19}\,\mathrm{J},$$

および換算 Planck 定数と光速

$$\hbar \simeq 1.055 \times 10^{-34}\,\mathrm{kg\,m^2/s}, \qquad c \simeq 2.998 \times 10^8\,\mathrm{m/s},$$

を用いるとよい。

[問 2]　水素原子の波動関数に関して、以下の問いに答えよ。Bohr 半径 a を用いてよい。

(1)　水素原子の動径方向の波動関数 $R_{10}(r), R_{20}(r), R_{21}(r)$ を

$$R_{nl}(r) = \sqrt{\left(\frac{2}{na}\right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n(n+l)!}} \left(\frac{2r}{na}\right)^l e^{-\frac{r}{na}} L^{2l+1}_{n-l-1}\left(\frac{2r}{na}\right),$$

を用いて求めよ。ここで Laguerre 多項式および Laguerre 陪多項式は

$$L_q(x) := \frac{e^x}{q!}\left(\frac{d}{dx}\right)^q (e^{-x}x^q), \qquad L^p_q(x) := (-1)^p \left(\frac{d}{dx}\right)^p L_{p+q}(x) = \frac{(-1)^p}{(p+q)!}\left(\frac{d}{dx}\right)^p \left[e^x \left(\frac{d}{dx}\right)^{p+q} (e^{-x}x^{p+q})\right],$$

で与えられる。

(2)　水素原子の波動関数 $\psi_{200}(r,\theta,\phi)$, $\psi_{211}(r,\theta,\phi)$, $\psi_{210}(r,\theta,\phi)$, $\psi_{21-1}(r,\theta,\phi)$ を

$$\psi_{nlm}(r,\theta,\phi) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta,\phi),$$

を用いて求めよ。ここで球面調和関数は

$$Y_{lm}(\theta,\phi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}\frac{(l-m)!}{(l+m)!}} e^{im\phi} P^m_l(\cos\theta),$$

で与えられ、Legendre 多項式 $P_l(x)$ および Legendre 陪関数 $P^m_l(x)$ は

$$P_l(x) := \frac{1}{2^l l!}\left(\frac{d}{dx}\right)^l (x^2-1)^l, \qquad P^m_l(x) := (-1)^m (1-x^2)^{\frac{m}{2}} \left(\frac{d}{dx}\right)^m P_l(x) = \frac{(-1)^m}{2^l l!}(1-x^2)^{\frac{m}{2}} \left(\frac{d}{dx}\right)^{l+m} (x^2-1)^l,$$

で与えられる。

[問 3]　水素原子の動径方向の波動関数について、$v(\rho)$ の満たす微分方程式

$$\frac{d^2}{d\rho^2}v(\rho) + \frac{2(l+1-\rho)}{\rho}\frac{d}{d\rho}v(\rho) + \frac{\rho_0 - 2(l+1)}{\rho}v(\rho) = 0,$$

の解が Laguerre 陪多項式を用いて

$$v(\rho) \propto L_{n-l-1}^{2l+1}(2\rho),$$

と与えられることを示そう。ここで Laguerre 多項式および Laguerre 陪多項式は

$$L_q(x) := \frac{e^x}{q!}\left(\frac{d}{dx}\right)^q (e^{-x}x^q), \qquad L_q^p(x) := (-1)^p \left(\frac{d}{dx}\right)^p L_{p+q}(x) = \frac{(-1)^p}{(p+q)!}\left(\frac{d}{dx}\right)^p \left[e^x \left(\frac{d}{dx}\right)^{p+q} (e^{-x}x^{p+q})\right],$$

で与えられる。ただし p, q は 0 以上の整数である。

(1)　恒等式

$$x\frac{d}{dx}(e^{-x}x^q) = -e^{-x}x^{q+1} + qe^{-x}x^q,$$

を示せ。

(2)　(1) で導いた式に $\frac{d^{q+1}}{dx^{q+1}}$ を作用させることにより、Laguerre 多項式が Laguerre の微分方程式

$$x\frac{d^2}{dx^2}L_q(x) + (1-x)\frac{d}{dx}L_q(x) + qL_q(x) = 0,$$

を満たすことを示せ。計算すべき項は

$$\frac{d^{q+1}}{dx^{q+1}}\left[x\frac{d}{dx}(e^{-x}x^q)\right], \qquad \frac{d^{q+1}}{dx^{q+1}}\left[-e^{-x}x^{q+1}\right], \qquad \frac{d^{q+1}}{dx^{q+1}}\left[qe^{-x}x^q\right],$$

であるが、1 項目については $q+1$ 回の微分 $\frac{d^{q+1}}{dx^{q+1}}$ のうち何回が x に当たり、何回が $\frac{d}{dx}(e^{-x}x^q)$ に当たるか考えるとよい。同様に 2 項目については

$$\frac{d^{q+1}}{dx^{q+1}}\left[-e^{-x}x^{q+1}\right] = \frac{d^{q+1}}{dx^{q+1}}\left[-e^{-x}x^q \cdot x\right]$$

と分解した上で $q+1$ 回の微分 $\frac{d^{q+1}}{dx^{q+1}}$ のうち何回が $e^{-x}x^q$ に当たり、何回が x に当たるか考えるとよい。

(3)　(2) で導いた式において、まず $q \to q+p$ とすることで

$$x\frac{d^2}{dx^2}L_{p+q}(x) + (1-x)\frac{d}{dx}L_{p+q}(x) + (p+q)L_{p+q}(x) = 0,$$

を得る。ここに $\frac{d^p}{dx^p}$ を作用させることで、Laguerre 陪多項式

$$L_q^p(x) := (-1)^p\left(\frac{d}{dx}\right)^p L_{p+q}(x),$$

が微分方程式

$$x\frac{d^2}{dx^2}L_q^p(x) + (1+p-x)\frac{d}{dx}L_q^p(x) + qL_q^p(x) = 0,$$

を満たすことを示せ。

(4)　(3) で導いた式において、$p = 2l+1,\, q = n-l-1,\, x = 2\rho$ とすると $v(\rho)$ の満たすべき微分方程式に帰着することを示せ。動径方向の波動関数が規格化可能であるという条件より、$\rho_0 = 2n$ が得られていることに注意すること。