§11 三次元球対称ポテンシャル問題

[1] 次の極座標表示を考える。

$$(x,y,z)=(r\sin\theta\cos\varphi, r\sin\theta\sin\varphi, r\cos\theta),\quad 0\le r<\infty,\ 0\le\theta\le\pi,\ 0\le\varphi<2\pi.$$

(a) 次式を証明せよ。

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial x} &= \sin\theta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial r}+\frac{\cos\theta\cos\varphi}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}-\frac{\sin\varphi}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi},\\
\frac{\partial}{\partial y} &= \sin\theta\sin\varphi\frac{\partial}{\partial r}+\frac{\cos\theta\sin\varphi}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}+\frac{\cos\varphi}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi},\\
\frac{\partial}{\partial z} &= \cos\theta\frac{\partial}{\partial r}-\frac{\sin\theta}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}.
\end{aligned}$$

(b) $dxdydz=r^2\sin\theta drd\theta d\varphi$ を証明せよ。

(c) 次式を証明せよ。

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}=\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}r-\frac{\hat{l}^2}{r^2},\qquad \hat{l}^2\equiv-\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}-\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}.$$

[2] 質量 m の粒子が球対称ポテンシャル $V(r)$ の下で運動している。

(a) Schrödinger 方程式を書き下し、極座標 (r,θ,φ) では次のように表されることを示せ。

$$\left[\frac{\hat{p}_r^2}{2m}+\frac{\hbar^2\hat{l}^2}{2mr^2}+V(r)\right]\psi(\mathbf{r})=E\psi(\mathbf{r}).$$

ただし、演算子 $\hat{p}_r$ と $\hat{l}^2$ は次式で定義されている。

$$\hat{p}_r\equiv-i\hbar\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}r,\qquad \hat{l}^2\equiv-\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}-\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}.$$

(b) 波動関数に対し $\psi(\mathbf{r})=R(r)Y(\theta,\varphi)$ と変数分離形を仮定する。$R(r)$ と $Y(\theta,\varphi)$ に対する微分方程式が以下のようになることを示せ。

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r}\frac{d^2}{dr^2}(rR)+\left[\frac{\hbar^2\Lambda}{2mr^2}+V(r)\right]R=ER, \tag{1a}$$

$$\hat{l}^2Y=\Lambda Y. \tag{1b}$$

[3] 後に演習 (角運動量とスピン) で示すように、(1b) 式の固有値と固有関数は次式で与えられる。

$$\Lambda=\ell(\ell+1),\qquad \ell=0,1,2,\cdots, \tag{2a}$$

$$Y_{\ell m}(\theta,\varphi)=\frac{(-1)^\ell}{2^\ell\ell!}\sqrt{\frac{(2\ell+1)(\ell+m)!}{4\pi(\ell-m)!}}\frac{1}{(1-z^2)^{m/2}}\frac{d^{\ell-m}}{dz^{\ell-m}}(1-z^2)^\ell\bigg|_{z=\cos\theta}\mathrm{e}^{im\varphi}. \tag{2b}$$

ただし、$m=0,\pm1,\cdots,\pm\ell$。

(a) $\ell \leq 2$ について $Y_{\ell m}(\theta,\varphi)$ を具体的に書き下せ。

(b) 規格直交性

$$\langle Y_{\ell m}|Y_{\ell' m'}\rangle \equiv \int_0^\pi d\theta \sin\theta \int_0^{2\pi} d\varphi\, Y^*_{\ell m}(\theta,\varphi) Y_{\ell' m'}(\theta,\varphi) = \delta_{\ell\ell'}\delta_{mm'}$$

が成立していることを $\ell, \ell' \leq 1$ について具体的に示せ。

[4] 質量 m の粒子が、半径 a と b の球殻 $(a < b)$ の間に閉じ込められている。このポテンシャルを

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

とモデル化し、基底状態のエネルギーと規格化された波動関数を求めよ。

[5] 質量 m_1 及び m_2 の 2 粒子が、それらの間の距離 r だけに依存するポテンシャル $V(r)$ によって相互作用している。この系の Hamiltonian は次式で与えられる。

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_1}\nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m_2}\nabla_2^2 + V(r).$$

(a) この Hamiltonian が、重心座標 $\mathbf{R} \equiv \dfrac{m_1\mathbf{r}_1 + m_2\mathbf{r}_2}{m_1+m_2}$ と相対座標 $\mathbf{r} \equiv \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$ を用いて

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2M}\nabla_R^2 - \frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla_r^2 + V(r). \tag{3}$$

と表されることを示せ。ただし $M \equiv m_1 + m_2$ は全質量、また $\mu \equiv \dfrac{m_1 m_2}{m_1+m_2}$ は換算質量である。

(b) 波動関数を $\Psi(\mathbf{R})\psi(\mathbf{r})$ と置いて、$\Psi(\mathbf{R})$ 及び $\psi(\mathbf{r})$ に対する方程式を求めよ。

(c) $\Psi(\mathbf{R})$ は平面波となることを示せ。

[6] (3) 式で水素型原子を考えると、相互作用のポテンシャルは

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{r} \qquad (Z = 1)$$

で与えられる。

(a) 相対運動の波動関数を $\psi(\mathbf{r}) = R_l(r) Y_{lm}(\theta,\varphi)$ と置き、$R_l(r)$ についての方程式を書き下せ。ただし、$Y_{lm}(\theta,\varphi)$ は (2b) 式で与えられている。また、相対運動のエネルギーを E とする。

(b) 以下、束縛状態 $(E < 0)$ の固有関数を考察する。まず、特徴的な長さ a および関数 y_l を

$$a = \frac{\hbar^2}{\mu Z e^2}, \qquad y_l = rR_l,$$

で定義する。次に、無次元量

$$\varepsilon = \sqrt{-\frac{2\mu a^2 E}{\hbar^2}}, \qquad \rho = \frac{r}{a},$$

を導入する。これら諸量を用いて Schrödinger 方程式を次のように書き換えよ。

$$\frac{d^2 y_l}{d\rho^2} + \left[-\frac{l(l+1)}{\rho^2} + \frac{2}{\rho} - \varepsilon^2 \right] y_l = 0.$$

(c) ρ が 0 の近傍では $y_l \sim \rho^s,\ s = l+1, -l$ のように振舞い、$\rho \gg 1$ では $y_l \sim \mathrm{e}^{\pm\varepsilon\rho}$ となることを示せ。

(d) 波動関数の正則性と規格化可能性の要請から、解を $y_l = \mathrm{e}^{-\varepsilon\rho}\rho^{l+1} f_l(\rho)$ の形に置ことができる。$f_l(\rho)$ に対する方程式が次式で与えられることを示せ。

$$\frac{d^2 f_l}{d\rho^2} + 2\left(\frac{l+1}{\rho} - \varepsilon\right)\frac{df_l}{d\rho} + 2\frac{1-\varepsilon(l+1)}{\rho} f_l = 0. \tag{4}$$

[7] 微分方程式 (4) に関する以下の問いに答えよ。

(a) $\rho = 0$ は確定特異点である。従って、未知関数 f_l を

$$f_l(x) = \sum_{k=0}^{\infty} c_k \rho^{k+\lambda} \qquad (c_0 \neq 0) \tag{5}$$

と展開して微分方程式を解くことが出来る。c_k についての漸化式を書き下せ。

(b) $\rho^{\lambda-2}$ の係数より、λ の値を定めよ。

(c) 「波動関数は $\rho = 0$ で正則」であることから、$\lambda \geq -l$ の解のみを考察すればよい。この場合に、(5) の展開が有限級数となるための条件を書き下し、水素型原子のエネルギー固有値を求めよ。

(d) 各エネルギー固有値に対して異なった状態の数（縮退度）を求めよ。

(e) 方程式 (4) の多項式解を具体的に求めることにより、水素原子の基底状態及び第一励起状態の波動関数を書き下せ。

(f) 水素原子の基底状態において r の期待値を求めよ。但し、Bohr 半径 $a_0 = \hbar^2/me^2 = 5.3 \times 10^{-9}$ cm を単位とせよ。

[8] 三次元等方的調和振動子の Hamiltonian は次式で与えられる。

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \frac{1}{2}m\omega^2 r^2. \tag{6}$$

この系のエネルギー固有値を極座標を用いて求めることを考える。

(a) 波動関数を $\psi(\mathbf{r}) = R_l(r) Y_{lm}(\theta, \varphi)$ とおいて Schrödinger 方程式を書き下し、$R_l(r)$ についての方程式が次式で与えられることを示せ。

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r}\frac{d^2}{dr^2}(rR_l) + \left[\frac{\hbar^2}{2m}\frac{l(l+1)}{r^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 r^2\right] R_l = E\,R_l.$$

(b) 関数 $y_l = rR_l$ および無次元量

$$\varepsilon = \frac{2E}{\hbar\omega}, \qquad \rho = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}r,$$

を導入して (a) の方程式を次式のように書き換えよ。

$$\frac{d^2 y_l}{d\rho^2} + \left[-\frac{l(l+1)}{\rho^2} + \varepsilon - \rho^2\right] y_l = 0.$$

(c) $\rho \to 0$ では $y_l \sim \rho^s,\ s = l+1, -l$ のように振舞い、また、$\rho \to \infty$ では $y_l \sim \mathrm{e}^{\pm\rho^2/2}$ と近似できることを示せ。

(d) 波動関数の正則性と規格化可能性の要請から、解を $y_l = \mathrm{e}^{-\rho^2/2}\rho^{l+1} f_l(\rho)$ の形に置くことができる。$f_l(\rho)$ に対する方程式が次式で与えられることを示せ。

$$\frac{d^2 f_l}{d\rho^2} + 2\left(\frac{l+1}{\rho} - \rho\right)\frac{df_l}{d\rho} + (\varepsilon - 2l - 3) f_l = 0 \tag{7}$$

[9] 微分方程式 (7) に関する以下の問いに答えよ。

(a) $\rho = 0$ は確定特異点である。従って、未知関数 f_l を

$$f_l(x) = \sum_{k=0}^{\infty} c_k \rho^{k+\lambda} \qquad (c_0 \neq 0) \tag{8}$$

と展開して微分方程式を解くことが出来る。c_k についての漸化式を書き下せ。

(b) $\rho^{\lambda-2}$ の係数より、λ の値を定めよ。

(c) 「波動関数は $\rho = 0$ で正則」であることから、$\lambda \geq -l$ の解のみを考察すればよい。この場合に、(8) の展開が有限級数であるための条件を書き下し、エネルギー固有値を求めよ。

(d) 各エネルギー固有値に対してどの様な角運動量の状態が含まれているか答えよ。

(e) 各エネルギー固有値に対して異なった状態の数（縮退度）を求めよ。

[10] 自由粒子 $[V(r) = 0]$ の動径方向の波動関数 $R(r)$ は次の微分方程式に従う ($\ell = 0, 1, 2, \cdots$)。

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r}\frac{d^2}{dr^2}(rR) + \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2mr^2} R = ER. \tag{9}$$

(a) 波数 $k \equiv \sqrt{2mE}/\hbar$ を用いて無次元の長さ $\rho = kr$ を導入する。$R(r) = F(\rho)/\sqrt{\rho}$ と置いて $F(\rho)$ が次の方程式に従うことを示せ。

$$\frac{d^2 F}{d\rho^2} + \frac{1}{\rho}\frac{dF}{d\rho} + \left(1 - \frac{\nu^2}{\rho^2}\right) F = 0, \qquad \nu \equiv l + \frac{1}{2}. \tag{10}$$

(b) (10) 式は Bessel の微分方程式と呼ばれる。この解 F は $\rho \ll 1$ では $\rho^{\pm\nu}$、また $\rho \to \infty$ では $e^{\pm i\rho}$ と振舞うことを示せ。

(c) $\rho = 0$ は方程式 (10) の確定特異点である。未知関数 $F(\rho)$ を

$$F(\rho) = \sum_{k=0}^{\infty} c_k \rho^{k+\lambda} \qquad c_0 \neq 0,$$

と置いて、c_k に対する漸化式を書き下せ。

(d) $\rho^{\lambda-2}$ の係数より、λ の値を定めよ。

(e) 漸化式を解いて c_k を c_0 で表し、次に c_0 を適当に選ぶことにより、(10) 式の解が Bessel 関数

$$J_{\pm\nu}(\rho) = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-1)^m}{m!\,\Gamma(\pm\nu + m + 1)} \left(\frac{\rho}{2}\right)^{2m\pm\nu}$$

で与えられることを示せ。ここで、Γ は、$\Gamma(z+1) = z\Gamma(z)$ および $\Gamma(\frac{1}{2}) = \sqrt{\pi}$ を満たすガンマ関数である。

(f) (a) と (e) より、(9) 式の解は、球 Bessel 関数

$$j_l(\rho) = \left(\frac{\pi}{2\rho}\right)^{1/2} J_{l+\frac{1}{2}}(\rho), \qquad n_l(\rho) = (-1)^{l+1} \left(\frac{\pi}{2\rho}\right)^{1/2} J_{-l-\frac{1}{2}}(\rho),$$

を用いて表すことが出来ることが分かる。しかし、自由粒子に対する Schrödinger 方程式 (9) の解としては、$n_l(kr)$ は不適である。なぜか？