平成 11 年度北海道大学大学院理学研究科

物理学専攻修士課程 (物理学分野) 入試問題

問題 T-I

水素原子のハミルトニアン$\hat{H}$は、

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2M}\nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m} - \frac{e^2}{|\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2|} \tag{1}$$

で与えられる。ここで、陽子の質量を M、電荷を e、位置ベクトルを$\boldsymbol{r}_1$とし、電子の質量を m、電荷を$-e$、位置ベクトルを$\boldsymbol{r}_2$とする。このハミルトニアンに体する Schrödinger 方程式は

$$\hat{H}\Psi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) = E\Psi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) \tag{2}$$

で与えられる。以下の問いに答えよ。

1. まず、原子核 (陽子) と電子の相対運動に対する Schrödinger 方程式を求める。

(1) 水素原子の重心位置ベクトルを$\boldsymbol{R}$とし、陽子と電子の相対座標ベクトルを$\boldsymbol{r}$とする時、それらは、

$$\begin{cases} \boldsymbol{R} &= \frac{M\boldsymbol{r}_1 + m\boldsymbol{r}_2}{M+m} \\ \boldsymbol{r} &= \boldsymbol{r}_2 - \boldsymbol{r}_1 \end{cases} \tag{3}$$

で与えられる。この座標系で、ハミルトニアンを表せば、

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2(M+m)}\nabla_R^2 - \frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla_r^2 - \frac{e^2}{r} \tag{4}$$

と書けることを示せ。

(2) 波動関数を

$$\Psi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) = \Psi(\boldsymbol{R})\phi(\boldsymbol{r}) \tag{5}$$

のように重心座標と相対座標についての変数分離形で表せば、Schrödinger 方程式は

$$-\frac{\hbar^2}{2(M+m)}\nabla_R^2\Psi(\boldsymbol{R}) = E_R\Psi(\boldsymbol{R}) \tag{6}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla - 2_r\phi(\boldsymbol{r} - \frac{e^2}{r}\phi(\boldsymbol{r}) = E_r\phi(\boldsymbol{r}) \tag{7}$$

となることを示せ。ここで、$E = E_R + E_r$とする。

2. 相対運動に対する Schrödinger 方程式は、相互作用 (クーロンポテンシャル) が中心力であることから、回転運動の固有状態と動径方向の運動状態に分離される。そこで、式 (7) のハミルトニアンを極座標$\boldsymbol{r} = (r, \theta, \varphi)$ で表せば、

$$\hat{H}_r = \frac{\hat{p}_r^2}{2\mu} + \frac{\hat{l}^2}{2\mu r^2} - \frac{e^2}{r}, \tag{8}$$

ただし、

$$\hat{p}_r = \frac{\hbar}{i}\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}r,\ \hat{l}^2 = -\frac{\hbar^2}{\sin^2\theta}\left\{\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right\}, \tag{9}$$

となる。

(1) 電子の軌道角運動量演算子$\hat{l}^2$の固有値問題

$$\hat{l}^2 Y_{lm}(\theta,\varphi) = \hbar^2 l(l+1) Y_{lm}(\theta,\varphi), \tag{10}$$

の固有関数 $Y_{lm}(\theta,\varphi)$ を用いて、$\phi(\boldsymbol{r}) = R_l(r)Y_{lm}(\theta,\varphi)$ とおけば、動径波動関数 $R_l(r)$ が満たす方程式は

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{\mathrm{d}^2 R_l}{\mathrm{d}r^2} + \frac{2}{r}\frac{\mathrm{d}R_l}{\mathrm{d}r} - \frac{l(l+1)}{r^2}R_l\right) - \frac{e^2}{r}R_l = E_r R_l \tag{11}$$

と書ける。$l=0$ の時、陽子のまわりの電子の存在確率分布の角度 (θ,φ) 依存性とその物理的意味について述べ、固有関数 $Y_{lm}(\theta,\varphi)$ を記せ。

(2) 演算子$\hat{p}_r$と rの交換関係

$$[r, \hat{p}_r] = i\hbar \tag{12}$$

を示せ。また、

$$\hat{A}_n = \hat{p}_r + i\left(a_n + \frac{b_n}{r}\right),\ \hat{A}_n^\dagger = \hat{p}_r - i\left(a_n + \frac{b_n}{r}\right) \tag{13}$$

の演算子を定義する。$c = \mu e^2$、$a_1 = -\frac{c}{(l+1)\hbar}$、$b_1 = (l+1)\hbar$ とおけば、

$$\hat{A}_1^\dagger \hat{A}_1 + \alpha^{(1)} = \hat{p}_r^2 + \frac{l(l+1)\hbar^2}{r^2} - \frac{2c}{r} \tag{14}$$

となることを示せ。ただし、

$$\alpha^{(1)} = -\frac{c^2}{\{(l+1)\hbar\}^2} \tag{15}$$

である。

3. 以上のことを用いて、動径部分に対する Schrödinger 方程式を解く。

(1) 式 (13) における定数 a_n、b_nを次のように取り、

$$a_n = -\frac{c}{(l+n)\hbar},\ b_n = (l+n)\hbar \tag{16}$$

$\alpha^{(n)}$を

$$\alpha^{(n)} = -\frac{c^2}{\{(l+n)\hbar\}^2} \tag{17}$$

と取るとき、

$$\hat{A}_{n+1}^\dagger \hat{A}_{n+1} + \alpha^{(n+1)} = \hat{A}_n^\dagger \hat{A}_n + \alpha^{(n)} \tag{18}$$

が成り立つことを示せ。また、

$$\hat{H}^{(n)} = \hat{A}_n^\dagger \hat{A}_n + \alpha^{(n)} \tag{19}$$

とおけば、次の関係が成り立つことを示せ。

$$\hat{H}^{(n)} \hat{A}_n^\dagger = \hat{A}_n^\dagger \hat{H}^{(n+1)} \tag{20}$$

(2) ここで、Schrödinger 方程式 (11) の固有状態を

$$u^{(n)} = \hat{A}_1^{\dagger}\hat{A}_2^{\dagger}\cdots\hat{A}_{n-1}^{\dagger}u^{(n-1)} \tag{21}$$

とおく。ただし、

$$\hat{A}_n u^{(n-1)} = 0 \tag{22}$$

とする。この固有状態について、式 (19)〜(22) を用いて

$$\hat{H}^{(1)}u\ (n) = \alpha^{(n)}u^{(n)} \tag{23}$$

となること、また、エネルギー固有値が次の式で与えられることを示せ。

$$E_r = \frac{1}{2\mu}\alpha^{(n)} = -\frac{\mu e^4}{2\{(l+n)\hbar\}^2} \tag{24}$$