

平成 13 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 C-II

水素原子を量子力学に基づいて考える。電子とプロトンの質量をそれぞれ m_1, m_2 、電荷を $-e, e$ 、位置ベクトルを $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2$ とする。

(1) この系のエネルギー E_t の定常状態のシュレーディンガーアルゴリズムをかけ。

(2) 新しい位置ベクトル

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2, \quad \mathbf{R} = (m_1 \mathbf{r}_1 + m_2 \mathbf{r}_2) / (m_1 + m_2)$$

を導入し、(1) のハミルトニアンを変数変換せよ。

また得られるハミルトニアンの特徴から、変換された (1) の方程式の解に変数分離解 $\eta(\mathbf{R})\phi(\mathbf{r})$ があることがわかる。その特徴とは何か？

(3) 相対運動のシュレーディンガーアルゴリズムを球座標でかくと

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu r^2} \left[\frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) - \hat{\mathbf{l}}^2 \psi \right] - \frac{e^2}{r} \psi = E \psi$$

となる。ここで

$$\begin{aligned} \mu &= m_1 m_2 / (m_1 + m_2), \\ \hat{\mathbf{l}}^2 &= \hat{l}_x^2 + \hat{l}_y^2 + \hat{l}_z^2, \end{aligned}$$

であり、 $\hat{l}_x, \hat{l}_y, \hat{l}_z$ はそれぞれ角運動量オペレーター $\hat{\mathbf{l}}$ の x, y, z 成分である。

この方程式の解として \hat{l}^2 と \hat{l}_z が一定の値をもつ

$$\phi(\mathbf{r}) = R(r) Y_{lm}(\theta, \varphi)$$

の形のものを求めよう。 $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ は球面調和関数であり、

$$\hat{l}_z Y_{lm}(\theta, \varphi) = m \hbar Y_{lm}(\theta, \varphi), \quad \hat{\mathbf{l}}^2 Y_{lm}(\theta, \varphi) = l(l+1) \hbar^2 Y_{lm}(\theta, \varphi).$$

動径波動関数 $R(r)$ の従う方程式を求めよ。

(4) $r \rightarrow 0$ の極限の動径波動関数の形を $R(r) = Ar^b$ と仮定する。ここで A, b は定数である。(3) で得られた方程式にこの $R(r)$ を代入し、原点で有限な解を与える b を求めよ。

(5) 電子の波動関数は主量子数 n 、方位量子数 l 、磁気量子数 m で特徴付けられる。ここで、 n は正の整数で、 $n \geq l + 1$ の条件がある。原子核の近く ($r \rightarrow 0$ の極限と考える) で存在確率密度がゼロでない電子の状態はどうのような量子数の組か。理由を付して答えよ。