量子力学　8222104　桧崎太輔

$$E_n = -\frac{me^4Z^2}{32\pi^2\varepsilon_0^2\hbar^2}\cdot\frac{1}{n^2} \quad — ①$$

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r} \quad — ②$$

$$\frac{dE(\lambda)}{d\lambda} = \left\langle \Psi_\lambda \middle| \frac{d\hat{H}(\lambda)}{d\lambda} \middle| \Psi_\lambda \right\rangle \quad — ③$$

(1) $\langle V \rangle \equiv \langle nlm|V|nlm\rangle \; 2E_n$

①の両辺を微分して.

$$\frac{E_n(Z)}{dZ} = -\frac{2me^4Z}{32\pi^2\varepsilon_0^2\hbar^2}\cdot\frac{1}{n^2} = -\frac{me^4Z}{16\pi^2\varepsilon_0^2\hbar^2}\cdot\frac{1}{n^2} \quad — ④$$

②の両辺をZについて微分して.

$$\frac{d\hat{H}}{dm} = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r} \quad — ⑤$$

$\lambda = Z$, $\Psi_\lambda = nlm$ を③に代入して.

$$\frac{E_n(Z)}{dZ} = \left\langle nlm \middle| \frac{d\hat{H}}{dZ} \middle| nlm \right\rangle \quad — ⑥$$

⑥に④,⑤を代入すると.

$$-\frac{me^4Z}{16\pi^2\varepsilon_0^2\hbar^2}\cdot\frac{1}{n^2} = \left\langle nlm \middle| -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r} \middle| nlm \right\rangle \quad — ⑦$$

定義より,

$$\langle V \rangle \equiv \langle nlm|V|nlm\rangle$$
$$\equiv \left\langle nlm \middle| \frac{-Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r} \middle| nlm \right\rangle$$

よって、⑦と①より、

$$\langle v \rangle \equiv \langle nlm | v | nlm \rangle$$

$$= \langle nlm | -\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r} | nlm \rangle$$

$$= Z \langle nlm | -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r} | nlm \rangle$$

$$= 2 \cdot -\frac{me^4 Z}{16\pi^2\varepsilon_0^2\hbar^2} \cdot \frac{1}{n^2}$$

$$= 2 \cdot \underbrace{-\frac{me^4 Z}{32\pi^2\varepsilon_0\hbar^2} \cdot \frac{1}{n^2}}_{= E_n}$$

$$= 2E_n$$

したがって、$\langle v \rangle \equiv \langle nlm | v | nlm \rangle = 2E_n$ が成り立つ。

(2) $\langle k \rangle \equiv \langle nlm | k | nlm \rangle = -E_n$

①の両辺を m について微分して、

$$\frac{dE_n(m)}{dm} = -\frac{e^4 Z^2}{32\pi^2\varepsilon_0^2\hbar^2} \cdot \frac{1}{n^2} \quad \text{—⑧}$$

②の両辺も同様に微分して、

$$\frac{dH}{dm} = \frac{d}{dm}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\right) = \frac{\hbar^2}{2m^2}\nabla^2 \quad \text{—⑨}$$

③に $\lambda = m$, $\Psi_\lambda = nlm$ を代入して、

$$-\frac{e^4 Z^2}{32\pi^2\varepsilon_0^2\hbar^2} \cdot \frac{1}{n^2} = \langle nlm | \frac{\hbar^2}{2m^2}\nabla^2 | nlm \rangle \quad \text{—⑩}$$

また、定義より、

$$\langle k \rangle \equiv \langle nlm | k | nlm \rangle$$

$$= \langle nlm | -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 | nlm \rangle$$

10に8、9を代入して.

$$-\frac{e^4 Z^2}{32\pi^2\varepsilon_0^2\hbar^2}\cdot\frac{1}{n^2} = \langle nlm|\frac{\hbar^2}{2m^2}\nabla^2|nlm\rangle \quad —11$$

よって 11と1より.

$$\begin{aligned}\langle k\rangle &\equiv \langle nlm|k|nlm\rangle \\ &= \langle nlm|-\frac{\hbar^2}{2m^2}\nabla^2|nlm\rangle \\ &= -m\left(-\frac{me^4\hbar^2}{32\pi^2\varepsilon_0^2\hbar^2}\cdot\frac{1}{n^2}\right) \\ &= -\left(-\frac{me^4\hbar^2}{32\pi^2\varepsilon_0^2\hbar^2}\cdot\frac{1}{n^2}\right) \\ &= -E_n\end{aligned}$$

よって $\langle k\rangle \equiv \langle nlm|k|nlm\rangle = -E_n$ が示された.

(3) $\langle \frac{1}{r}\rangle \equiv \langle nlm|\frac{1}{r}|nlm\rangle = \frac{Z}{n^2 a_0}$

7より.

$$\langle nlm|-\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}|nlm\rangle = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\cdot\frac{me^2 Z}{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}\cdot\frac{1}{n^2}$$

e、π、ε_0 は定数なので、

$$-\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\langle nlm|\frac{1}{r}|nlm\rangle = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\cdot\frac{me^2 Z}{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}\cdot\frac{1}{n^2}$$

$$\langle nlm|\frac{1}{r}|nlm\rangle = \frac{me^2}{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}\cdot\frac{Z}{n^2}$$

ここで、$a_0 = \frac{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}{me^2}$ より、

$$\langle nlm|\frac{1}{r}|nlm\rangle = \frac{1}{a_0}\cdot\frac{Z}{n^2} = \frac{Z}{n^2 a_0}$$

よって $\langle \frac{1}{r}\rangle = \langle nlm|\frac{1}{r}|nlm\rangle = \frac{Z}{n^2 a_0}$ は示された.