P222036 栗山 淳

量子力学 第13回 課題

ヘルマン-ファインマンの定理

$$\frac{dE(\lambda)}{d\lambda} = \left\langle \psi_\lambda \middle| \frac{d\hat{H}(\lambda)}{d\lambda} \middle| \psi_\lambda \right\rangle$$

λに任意の文字を入れて計算する。

運動エネルギー　ポテンシャルエネルギー

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

$|nlm\rangle$ のエネルギー固有値 $E_n = -\frac{me^4Z^2}{32\pi^2\varepsilon_0^2\hbar^2}\frac{1}{n^2}$

ヘルマン-ファインマンの定理のλにZを代入して計算する

$$\frac{dE(Z)}{dZ} = \left\langle \psi_Z \middle| \frac{d\hat{H}(Z)}{dZ} \middle| \psi_Z \right\rangle$$

$$\Leftrightarrow \frac{dE(Z)}{dZ} = \left\langle \psi_Z \middle| \frac{d}{dZ}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\right) \middle| \psi_Z \right\rangle$$

$$\Leftrightarrow \frac{d}{dZ}\left(-\frac{me^4Z^2}{32\pi^2\varepsilon_0^2\hbar^2}\cdot\frac{1}{n^2}\right) \left\langle \psi_Z \middle| -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r} \middle| \psi_Z \right\rangle$$

$$\Leftrightarrow -\frac{2me^4Z}{32\pi^2\varepsilon_0^2\hbar^2}\frac{1}{n^2} = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\underbrace{\langle \psi_Z | \psi_Z \rangle}_{1}$$

$$\Leftrightarrow -2\cdot\frac{me^4Z}{32\pi^2\varepsilon_0^2\hbar^2}\frac{1}{n^2} = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}$$

$$\Leftrightarrow 2\cdot\left(-\frac{me^4Z}{32\pi^2\varepsilon_0^2\hbar^2}\cdot\frac{1}{n^2}\right) = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}$$

両辺にZを掛けると

$$\Leftrightarrow 2\cdot\left(-\frac{me^4Z^2}{32\pi^2\varepsilon_0^2\hbar^2}\frac{1}{n^2}\right) = -\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r}$$

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

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

$\langle V \rangle = 2E_n$ よって証明された

~~よってこれは証明~~

(3)

$$\langle K \rangle \equiv \langle nlm | K | nlm \rangle = -E_n$$

ヘルマン－ファインマンの定理のλにℏを代入して計算すると.

$$\frac{dE(\hbar)}{d\hbar} = \left\langle \psi_\hbar \middle| \frac{d\hat{H}(\hbar)}{d\hbar} \middle| \psi_\hbar \right\rangle$$

$$\Leftrightarrow \frac{d}{d\hbar}\left(-\frac{me^4Z^2}{32\pi^2\varepsilon_0^2\hbar^2}\cdot\frac{1}{n^2}\right) = \left\langle \psi_\hbar \middle| \frac{d}{d\hbar}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\right) \middle| \psi_\hbar \right\rangle$$

$$\Leftrightarrow \frac{me^4Z^2}{16\pi^2\varepsilon_0^2\hbar^3}\cdot\frac{1}{n^2} = \left\langle \psi_\hbar \middle| -\frac{\hbar}{m}\nabla^2 \middle| \psi_\hbar \right\rangle$$

$\left((\hbar)^{-2}\right)'$

$$\Leftrightarrow \frac{me^4Z^2}{16\pi^2\varepsilon_0^2\hbar^3}\cdot\frac{1}{n^2} = \underbrace{\langle \psi_\hbar | \psi_\hbar \rangle}_{=1} \cdot -\frac{\hbar}{m}\nabla^2$$

$$\Leftrightarrow \frac{me^4Z^2}{16\pi^2\varepsilon_0\hbar^3}\cdot\frac{1}{n^2} = -\frac{\hbar}{m}\nabla^2$$

両辺に $\frac{\hbar}{2}$ をかけると

$$\frac{me^4Z^2}{32\pi^2\varepsilon_0\hbar^2}\cdot\frac{1}{n^2} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2$$

$$\Leftrightarrow -\left(-\frac{me^4Z^2}{32\pi^2\varepsilon_0\hbar^2}\cdot\frac{1}{n^2}\right) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2$$

ここで $E_n = -\frac{me^4Z^2}{32\pi^2\varepsilon_0\hbar^2}\frac{1}{n^2}$

$\langle K \rangle = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2$ より

$\underline{\langle K \rangle = -E_n}$ より証明された.

(3)

$$\left\langle \frac{1}{r} \right\rangle = \langle n\ell m | \frac{1}{r} | n\ell m \rangle = \frac{Z}{n^2 a_0} = \frac{Z}{n^2} \cdot \frac{me^2}{4\pi\varepsilon_0\hbar^2} = \frac{me^2 Z}{4\pi\varepsilon_0\hbar^2} \cdot \frac{1}{n^2}$$

ヘルマン－ファインマンの定理に $\lambda = Z$ を代入して計算すると

$$\frac{dE(Z)}{dZ} = \left\langle \psi_Z \middle| \frac{d\hat{H}(Z)}{dZ} \middle| \psi_Z \right\rangle$$

$$\Leftrightarrow \frac{dE(Z)}{dZ} = \left\langle \psi_Z \middle| \frac{d}{dZ}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\right) \middle| \psi_Z \right\rangle$$

$$\Leftrightarrow \frac{d}{dZ}\left(-\frac{me^4Z^2}{32\pi^2\varepsilon_0^2\hbar^2} \cdot \frac{1}{n^2}\right) = \left\langle \psi_Z \middle| -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r} \middle| \psi_Z \right\rangle$$

$$\Leftrightarrow -\frac{2me^4Z}{32\pi^2\varepsilon_0^2\hbar^2} \cdot \frac{1}{n^2} = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r} \underbrace{\langle \psi_Z | \psi_Z \rangle}_{=1}$$

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

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

$$\Leftrightarrow \frac{Z}{n^2 a_0} = \left\langle \frac{1}{r} \right\rangle \qquad \left(\because a_0 = \frac{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}{me^2}\right)$$

よって証明された