平成 20 年 8 月 27 日

# 量子物理学

**以下の問について解答せよ．答えだけでなく導出の過程も簡単に記すこと．**

## 問．水素原子・摂動

必要なら，図 1 のように極座標系を設定した場合の

・極座標系での体積要素： $dV = r^2 \sin\theta dr d\theta d\phi$

・極座標系でのラプラシアンの表式：

$$\nabla^2\varphi = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\varphi}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\varphi}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\left(\frac{\partial^2\varphi}{\partial\phi^2}\right) \tag{1}$$

および

・積分の関係式：

$$\int_0^\infty \mathrm{e}^{-ax}x^{n-1}dx = \frac{(n-1)!}{a^n} \qquad (a > 0,\ n \text{ は正の整数}) \tag{2}$$

を利用して良い．

1) 水素原子の 1s 状態における動径方向の位置の期待値 $\langle r\rangle$ を求めよ．ただし 1s 状態の波動関数は

$$\varphi_{1\mathrm{s}} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}\left(\frac{1}{a_\mathrm{B}}\right)^{3/2} 2\exp\left(-\frac{r}{a_\mathrm{B}}\right) \tag{3a}$$

$$a_\mathrm{B} = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{me^2} \qquad (\text{Bohr 半径}) \tag{3b}$$

で与えられるとする．

2) 1s 状態での運動量の二乗の期待値 $\langle p^2\rangle$ および運動エネルギーの期待値を求めよ．

3) 1s 状態での Coulomb ポテンシャル $V(r) = -e^2/(4\pi\epsilon_0 r)$ の期待値 $\langle V(r)\rangle$ を求めよ．

4) 運動エネルギーの期待値と Coulomb ポテンシャルの期待値との関係を示せ．

5) 2)，3) の結果を利用して 1s 状態のエネルギー固有値 $E_{1\mathrm{s}}$ を求めよ．

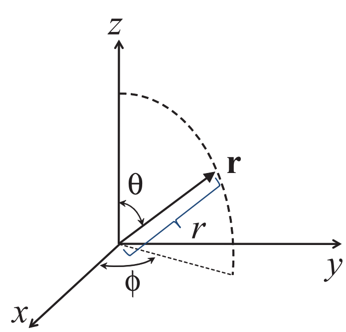


図 1: 直交座標 $(x, y, z)$ と極座標 $(r, \theta, \phi)$.

次に，仮想的に水素原子が一次元状に並んだ固体を考える (図 2)．話を簡単化するために，隣り合った 2 個の水素原子に着目し，各水素原子に局在した 1s 状態の波動関数をそれぞれ $\varphi_i$ $(i = a, b)$ と仮定する．このとき，各水素原子に対する Schrödinger 方程式は $H$ を水素原子のハミルトニアンとして

$$H\varphi_i = E_{1\mathrm{s}}\varphi_i, \qquad E_{1\mathrm{s}} = \int \varphi_i{}^* H \varphi_i d\boldsymbol{r} \tag{4}$$

となる．ただし，$\varphi_i$ は規格直交性

$$\int \varphi_i{}^* \varphi_j d\boldsymbol{r} = \delta_{ij} \tag{5}$$

を満たすものとする．

一方の水素原子が他方の原子の電子に及ぼすポテンシャルを $v(\boldsymbol{r})$ とし，それが働く時の系の全波動関数を各 1s 波動関数の線形結合

$$\Psi = A\varphi_a + B\varphi_b \tag{6}$$

であらわすと，全系の Schrödinger 方程式は

$$[H + v(\boldsymbol{r})]\,\Psi = E\Psi \tag{7}$$

となる．

6) 式 (7) の左辺からそれぞれ $\varphi_a{}^*$，$\varphi_b{}^*$ を掛けて積分し，$A$，$B$ の満たすべき方程式を求めよ．ただし，次の 2 つの量を用いて表現を簡単にせよ．両者とも**負の値**であるとする．

$$C \equiv \int \varphi_a{}^* v(\boldsymbol{r}) \varphi_a d\boldsymbol{r} = \int \varphi_b{}^* v(\boldsymbol{r}) \varphi_b d\boldsymbol{r} \qquad \text{(Coulomb 積分)} \tag{8a}$$

$$V \equiv \int \varphi_a{}^* v(\boldsymbol{r}) \varphi_b d\boldsymbol{r} = \int \varphi_b{}^* v(\boldsymbol{r}) \varphi_a d\boldsymbol{r} \qquad \text{(共鳴積分)} \tag{8b}$$

7) 6) の結果得られる方程式からエネルギー固有値を求めよ．

8) 6)，7) から対応する固有波動関数を規格化条件を考慮して求め，どの固有関数がどのエネルギー固有値に対応するかを示せ．

9) 2 つの水素原子の距離を適当に仮定した時に，各エネルギー固有状態における全電子の存在確率の概形を示し，その様子とエネルギー固有値の大きさについて論ぜよ．

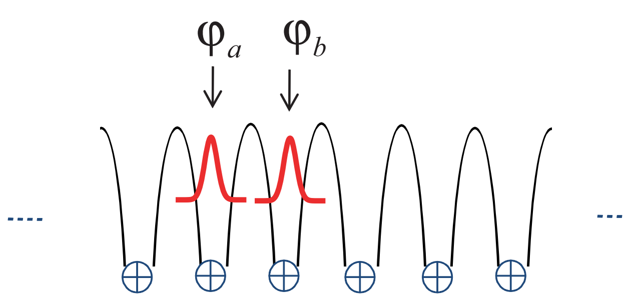


図 2: 水素原子固体モデル．

以上