

補助問題

齋藤 雅明

量子化学研究室

email: masa.saitow@chem.nagoya-u.ac.jp

問題 A. 球対称ポテンシャル中にある粒子の Schödinger 方程式の基底量子状態について考える。

$$H_{\text{radial}} = -\frac{\hbar^2}{2mr^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + V(r) \quad (1)$$

問い 1 式 (1) において運動エネルギー項が

$$-\frac{\hbar^2}{2mr^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) \Psi_{\text{radial}}(r) \rightarrow -\frac{\hbar^2}{2mr} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r \Psi_{\text{radial}}(r) \quad (2)$$

と変形できることを示せ。

問い 2 波動関数が

$$\lim_{r \rightarrow 0} \Psi_{\text{radial}}(r) \rightarrow \text{const} \quad (3)$$

$$\lim_{r \rightarrow \infty} r^2 \Psi_{\text{radial}}(r) \rightarrow 0 \quad (4)$$

となる場合、

$$|\Psi_{\text{radial}}(0)|^2 = -\frac{2m}{\hbar^2} \left\langle \frac{dV}{dr} \right\rangle \quad (5)$$

が成立することを示せ。

問い 3 水素原子の 1s 波動関数に対して式 (5) が成立することを確認めよ。