数理物理及び演習Ⅲ（量子力学）　*2004.6.10*

4　水素原子

1 【エネルギー固有値】

水素原子の動径部分の Schrödinger 方程式は，電子の換算質量を μ，電荷を $-e$ とすると

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{1}{r}\frac{d^2}{dr^2}r\right)+\frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2}-\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\right]R_l(r)=ER_l(r)$$

で与えられる（ただし，$E<0$, $l=0, 1, 2, \cdots$）。

(1) $R_l(r)=e^{-\frac{\rho}{2}}\rho^l L(\rho)$, $\rho=\frac{\sqrt{-8\mu E}}{\hbar}r$, $\lambda=\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0\hbar}\sqrt{-\frac{\mu}{2E}}$ とすると，動径方程式は

$$\rho\frac{d^2L(\rho)}{d\rho^2}+(2l+2-\rho)\frac{dL(\rho)}{d\rho}+(\lambda-1-l)L(\rho)=0$$

となることを示せ。

(2) $L(\rho)=\sum_{n=0}^{\infty}c_n\rho^n$ を (1) の結果に代入し，$\frac{c_{n+1}}{c_n}=\frac{n+l+1-\lambda}{(n+1)(n+2l+2)}$ を導け。これより，λ は正の整数（$=n$）であり，$n\geq l+1$ をみたすことを示せ。

(3) エネルギー固有値は，Bohr 半径 $a_0=\frac{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}{\mu e^2}=0.529$ Å を用いると

$$E_n=-\frac{e^2}{8\pi\varepsilon_0 a_0 n^2}$$

となることを示せ。

2 【波動関数と Laguerre の陪多項式】

(1) 問 **1**(1) で $\lambda=n$ とおいた動径方程式の解は，Laguerre の陪多項式

$$L_{n+l}^{2l+1}(\rho)=\sum_{k=0}^{n-l-1}(-1)^{k+2l+1}\frac{[(n+l)!]^2\rho^k}{(n-l-1-k)!\,(2l+1+k)!\,k!}$$

で与えられる。これを用いて，$n=1, 2$ のときの動径波動関数 $R_{nl}(r)$ をすべて求めよ。また，動径確率密度 $P_{nl}(r)=r^2[R_{nl}(r)]^2$ が最大値をとるときの r を求め，その概形を横軸を $\frac{r}{a_0}$ として図示せよ。規格化はしないでよい。

(2) $n=1$ のとき，波動関数を規格化せよ。また，r の期待値 $\langle r\rangle$ を求めよ。

(3) ビリアル定理を用いて，$n=1$ のときの電子の平均 2 乗速度 $\frac{\sqrt{\langle \boldsymbol{p}^2\rangle}}{\mu}$ が光速 c の約何分の 1 になるか計算せよ。ただし，$\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}=\frac{\hbar c}{137}$ を用いてよい。