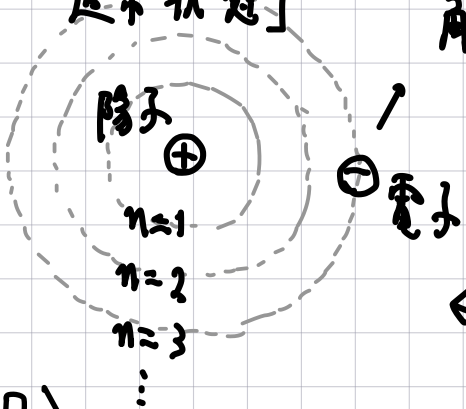
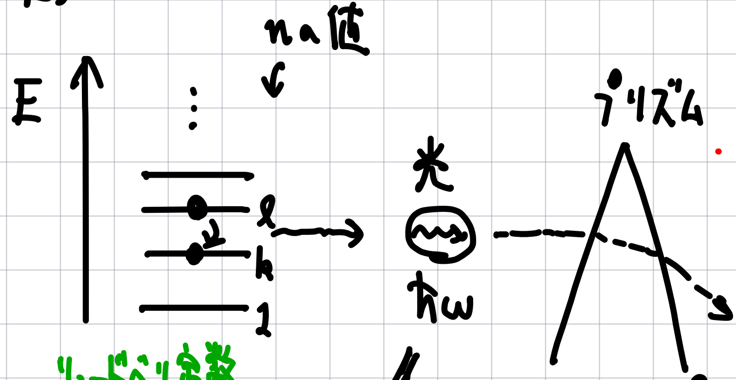
4.4 水素原子の束縛状態

例4.4 水素原子のBohr模型(1913年)

「定常状態」



角運動量 $= n\hbar$ ⇒ 半径 ⇒ エネルギー準位
(の量子化)



リュードベリ定数

$$\underbrace{Rch}_{\shortparallel}\left(\frac{1}{k^2}-\frac{1}{l^2}\right)$$

固有の波長(振動数)をもつ光

〈今日〉

水素原子のSchrödinger eq.を解く

$$H\varphi_n = E_n\varphi_n$$

これを求める

$$E_n = -C\frac{1}{n^2}$$

一致するか? 13.6eV

$(1\mathrm{eV} = 1.6\times10^{-19}\,\mathrm{J})$

$(m \simeq \mu)$

$$V(r) = -\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{r}$$

Bohr半径

$$\varepsilon := \frac{2ma_0^2}{\hbar^2}E,\quad \rho := \frac{r}{a_0}$$ とおく.

$$\left(a_0 := 4\pi\varepsilon_0\frac{\hbar^2}{me^2}\right)$$

宿題1 a_0の値を単位付きで有効数字2ケタで求めよ.
- m : 電子の質量
- e : 〃 電荷
- ε_0 : 真空の誘電率
- $\hbar$: プランク定数 (2πで割ったもの)

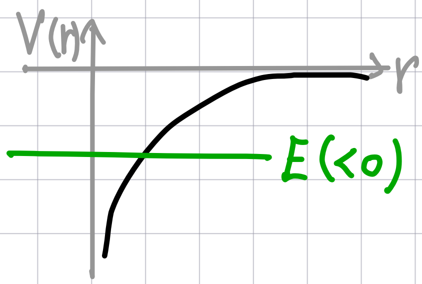
①を解く(来週) ⇝ $\lambda = l(l+1)$　$l \in \{0, 1, 2, \cdots\}$

今日は②を解く。$R(r) = R_l(r)$と書き、$u_l := \rho R_l$とおくと、

(Sch eq.)

$$\underbrace{\left[-\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{l(l+1)}{\rho^2} - \frac{2}{\rho}\right]}_{\shortparallel\atop H_l} u_l(\rho) = \varepsilon\, u_l(\rho)$$

$\varepsilon < 0$



以後 [砂川] P120 に沿う

"昇降ops."を導入:

$$\begin{cases} b_{\ell+k} := \dfrac{1}{i}\dfrac{d}{d\rho} + i\left(\dfrac{\ell+k}{\rho} - \dfrac{1}{\ell+k}\right) \\ b_{\ell+k}^{\dagger} = \dfrac{1}{i}\dfrac{d}{d\rho} - i\left(\dfrac{\ell+k}{\rho} - \dfrac{1}{\ell+k}\right) \end{cases} \quad k \in \{1, 2, \cdots\}$$

このとき、$H^{(k)} := -\dfrac{d^2}{d\rho^2} + \dfrac{(\ell+k-1)(\ell+k)}{\rho^2} - \dfrac{2}{\rho}$, $\varepsilon^{(\ell+k)} := -\dfrac{1}{(\ell+k)^2}$ として

$$\begin{cases} b_{\ell+k}^{\dagger} b_{\ell+k} = H^{(k)} - \varepsilon^{(\ell+k)} \\ b_{\ell+k} b_{\ell+k}^{\dagger} = H^{(k+1)} - \varepsilon^{(\ell+k)} \end{cases} \quad \cdots (\star)$$

$H^{(1)} \equiv H_\ell$ (もともとのH)

また $H^{(k)} b_{\ell+k}^{\dagger} = b_{\ell+k}^{\dagger} H^{(k+1)}$ が成り立つ。

∵ (左辺) $= (b_{\ell+k}^{\dagger} b_{\ell+k} + \varepsilon^{(\ell+k)}) b_{\ell+k}^{\dagger} = b_{\ell+k}^{\dagger} b_{\ell+k} b_{\ell+k}^{\dagger} + \varepsilon^{(\ell+k)} b_{\ell+k}^{\dagger}$

$= b_{\ell+k}^{\dagger} (b_{\ell+k} b_{\ell+k}^{\dagger} + \varepsilon^{(\ell+k)}) =$ (右辺) ▨

ここで、$b_{\ell+k}\, \varphi^{(\ell+k-1)} = 0 \quad \cdots (\ast\ast)$ をみたす関数を考える。

これは $H^{(k)}$ の最低固有値を与え、その固有値は $\varepsilon^{(\ell+k)}$.

∵ $H^{(k)} \varphi^{(\ell+k-1)} = (b_{\ell+k}^{\dagger} b_{\ell+k} + \varepsilon^{(\ell+k)}) \varphi^{(\ell+k-1)} = \varepsilon^{(\ell+k)} \varphi^{(\ell+k-1)}$.

また、$H^{(k)}$ の $\varphi^{(\ell+k-1)}$ 以外の固有関数を $\chi^{(\ell+k-1)}$ (規格化済) と書くと

$$\int_0^\infty \chi^{\dagger(\ell+k-1)} H^{(k)} \chi^{(\ell+k-1)} d\rho = \underbrace{\int_0^\infty |\underset{\neq 0}{b_{\ell+k}\chi}|^2 d\rho}_{>0\ (1次元では縮退がない)} + \varepsilon^{(\ell+k)}$$

$> \varepsilon^{(\ell+k)}$ ▨

$H^{(l)} \equiv H_\ell$ の固有関数を拾い出す

$b_{\ell+1}^\dagger b_{\ell+1} + \varepsilon^{(\ell+1)}$　$=0$

k=1　$u_{\ell+1} := \varphi^{(\ell)}$ は $H^{(l)}$ の固有値 $\varepsilon^{(\ell+1)}$ の解　∵ $H^{(l)} u_{\ell+1} = H^{(l)} \varphi^{(\ell)} = \varepsilon^{(\ell+1)} u_{\ell+1}$ ■

k=2　$u_{\ell+2} := b_{\ell+1}^\dagger \varphi^{(\ell+1)}$　〃　$\varepsilon^{(\ell+2)}$　〃　∵ $H^{(l)} u_{\ell+2} = H^{(l)} b_{\ell+1}^\dagger \varphi^{(\ell+1)} \overset{*}{=} b_{\ell+1}^\dagger \underbrace{H^{(2)} \varphi^{(\ell+1)}}_{\varepsilon^{(\ell+2)} \varphi^{(\ell+1)}}$ ■

⋮

k　$u_{\ell+k} := \overbrace{b_{\ell+1}^\dagger b_{\ell+2}^\dagger \cdots b_{\ell+k-1}^\dagger}^{k-1\,\text{コ}} \varphi^{(\ell+k-1)}$　〃　$\varepsilon^{(\ell+k)}$　〃

(**)から決まる

∵ 宿題2　これを示せ

よって $n := \ell + k$ とすると $\varepsilon^{(n)} = -\frac{1}{n^2}$　($\ell \in \{0, 1, \cdots, n-1\}$: 縮退)

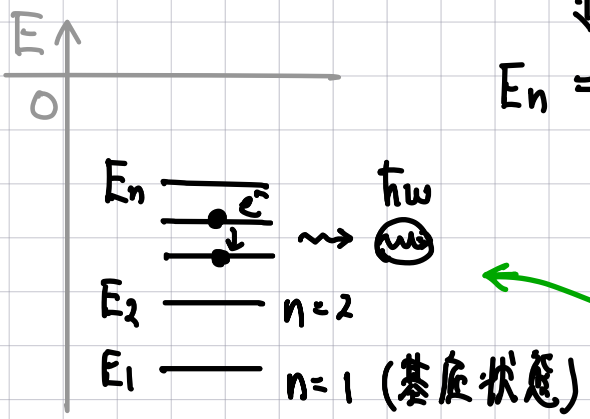
$\ell = n-k$

⇕

$$E_n = -\frac{\hbar^2}{2ma_0^2} \frac{1}{n^2}$$

‖ 計算

13.6eV (実験と一致!)



e^- が $E_n \to E_m$ $(n>m)$ と遷移し、エネルギー $\hbar\omega$ の光を放出

波動関数 (kを用いない)

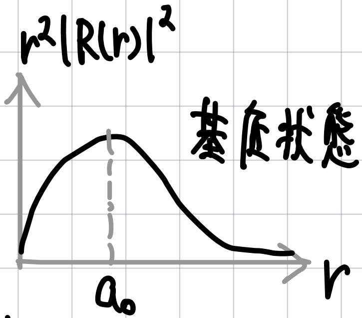
$$u_\ell^{(n)} := u_{\underbrace{\ell+k}_{n}} = \overbrace{b_{\ell+1}^\dagger \cdots b_{n-1}^\dagger}^{n-\ell-1\,\text{コ}} \varphi^{(n-1)}$$

$$(**) \Leftrightarrow \quad b_n \varphi^{(n-1)} = \left[\frac{1}{i}\frac{d}{d\rho} + i\left(\frac{n}{\rho} - \frac{1}{n}\right)\right] \varphi^{(n-1)} = 0$$

解: $\varphi^{(n-1)}(\rho) = C_n \rho^n e^{-\frac{\rho}{n}}$　規格化因子

$k = n-\ell \geq 1$

$n=1$ ($\ell=0$のみ)　$u_0^{(1)} = \varphi^{(0)} = 2\rho e^{-\rho}$ →



(k=1)

$n=2$ ($\ell=0,1$)　$u_0^{(2)} = b_1^\dagger \varphi^{(1)} \xleftarrow{b^\dagger} u_1^{(2)} = \varphi^{(1)}$

(k=2)　(k=3)

$n=3$ ($\ell=0,1,2$)　$u_0^{(3)} = b_1^\dagger b_2^\dagger \varphi^{(2)} \xleftarrow{b^\dagger} u_1^{(3)} = b_2^\dagger \varphi^{(2)} \xleftarrow{b^\dagger} u_2^{(3)} = \varphi^{(2)}$

(k=3)　(k=4)　(k=5)

4.5 (一般)角運動量の固有値問題

定義4.5 $\mathcal{H}$上のエルミートops. $\hat{J}_k$ $(k\in\{1,2,3\})$が以下をみたすとき、(一般)角運動量op.であるという。

(例)軌道角運動量op. $\hat{L}_k$ (P17)

$$[\hat{J}_j, \hat{J}_k] = i\epsilon_{jkl}\hat{J}_l$$

lについての和

命題4.6 $\hat{\vec{J}}^2 := \sum_{k=1}^{3} \hat{J}_k^2$ とすると。 $[\hat{\vec{J}}^2, \hat{J}_k] = 0$ $(^\forall k)$

注4.7 $[\hat{\vec{J}}^2, \hat{J}_3] = 0 \Rightarrow \hat{\vec{J}}^2$と$\hat{J}_3$の同時固有状態$|\lambda, m\rangle$が存在

今は書かない

$\hat{\vec{J}}^2$の固有値のラベル

$\hat{J}_3$

λ,を省略

$$\begin{cases} \hat{\vec{J}}^2 |m\rangle = \lambda |m\rangle & \cdots ③ \\ \hat{J}_3 |m\rangle = m|m\rangle & \cdots ④ \end{cases}$$

これを解く

$(\langle m|m\rangle = 1$とする$)$

③より

$$\lambda = \langle m|\hat{\vec{J}}^2|m\rangle = \sum_{k=1}^{3}\left|\hat{J}_k|m\rangle\right|^2 \geq 0$$