量子力学A演習　解答例 （演習14）v1.2

1.　$[\hat{L_x}, \hat{H}] = [\hat{L_y}, \hat{H}] = [\hat{L_z}, \hat{H}] = 0$ ならば、　$[\hat{L^2}, \hat{H}] = 0$　であることを示せ。

（解答例）

$[\hat{L^2}, \hat{H}] = [\hat{L_x^2} + \hat{L_y^2} + \hat{L_z^2}, \hat{H}] = [\hat{L_x^2}, \hat{H}] + [\hat{L_y^2}, \hat{H}] + [\hat{L_z^2}, \hat{H}]$

$= (\hat{L_x}[\hat{L_x}, \hat{H}] + [\hat{L_x}, \hat{H}]\hat{L_x}) + (\hat{L_y}[\hat{L_y}, \hat{H}] + [\hat{L_y}, \hat{H}]\hat{L_y}) + (\hat{L_z}[\hat{L_z}, \hat{H}] + [\hat{L_z}, \hat{H}]\hat{L_z})$

今、$[\hat{L_x}, \hat{H}] = [\hat{L_y}, \hat{H}] = [\hat{L_z}, \hat{H}] = 0$ なので、$[\hat{L^2}, \hat{H}] = 0$

2.　$\hat{H} = \dfrac{\hat{p^2}}{2m} + V(r)$ のとき、$[\hat{L_x}, \hat{H}] = [\hat{L_y}, \hat{H}] = [\hat{L_z}, \hat{H}] = 0$ を示せ

（解答例）

$[\hat{L_x}, \hat{H}] = 0$ を示す。

$[\hat{L_x}, \hat{H}] = [\hat{L_x}, \dfrac{\hat{p^2}}{2m} + V(r)] = \dfrac{1}{2m}[\hat{L_x}, \hat{p}^2] + [\hat{L_x}, V(r)]$　⋯(1)

ここで、$[\hat{L_x}, \hat{p}^2]$と$[\hat{L_x}, V(r)]$を別々に調べる。

$[\hat{L_x}, \hat{p}^2] = [\hat{L_x}, \hat{p}_x{}^2 + \hat{p}_y{}^2 + \hat{p}_z{}^2] = [\hat{L_x}, \hat{p}_x{}^2] + [\hat{L_x}, \hat{p}_y{}^2] + [\hat{L_x}, \hat{p}_z{}^2]$

$[\hat{L_x}, \hat{p}_x{}^2] = \hat{p}_x[\hat{L_x}, \hat{p}_x] + [\hat{L_x}, \hat{p}_x]\hat{p}_x$ 、

$[\hat{L_x}, \hat{p}_x] = [\hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y, \hat{p}_x] = [\hat{y}\hat{p}_z, \hat{p}_x] - [\hat{z}\hat{p}_y, \hat{p}_x] = \hat{y}[\hat{p}_z, \hat{p}_x] + [\hat{y}, \hat{p}_x]\hat{p}_z - \hat{z}[\hat{p}_y, \hat{p}_x] - [\hat{z}, \hat{p}_x]\hat{p}_y = 0$ なので、

$[\hat{L_x}, \hat{p}_x{}^2] = 0$　⋯ (2)

$[\hat{L_x}, \hat{p}_y{}^2] = \hat{p}_y[\hat{L_x}, \hat{p}_y] + [\hat{L_x}, \hat{p}_y]\hat{p}_y$ 、

$[\hat{L_x}, \hat{p}_y] = [\hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y, \hat{p}_y] = [\hat{y}\hat{p}_z, \hat{p}_y] - [\hat{z}\hat{p}_y, \hat{p}_y] = \hat{y}[\hat{p}_z, \hat{p}_y] + [\hat{y}, \hat{p}_y]\hat{p}_z - \hat{z}[\hat{p}_y, \hat{p}_y] - [\hat{z}, \hat{p}_y]\hat{p}_y = i\hbar\hat{p}_z$ なので、

$[\hat{L_x}, \hat{p}_y{}^2] = \hat{p}_y[\hat{L_x}, \hat{p}_y] + [\hat{L_x}, \hat{p}_y]\hat{p}_y = \hat{p}_y i\hbar\hat{p}_z + i\hbar\hat{p}_z\hat{p}_y = 2i\hbar\hat{p}_y\hat{p}_z$ ⋯ (3)　（注：$\hat{p}_z, \hat{p}_y$ 、$\hat{z}, \hat{p}_y$ などは交換可）

$[\hat{L_x}, \hat{p}_z{}^2] = \hat{p}_z[\hat{L_x}, \hat{p}_z] + [\hat{L_x}, \hat{p}_z]\hat{p}_z$

$[\hat{L_x}, \hat{p}_z] = [\hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y, \hat{p}_z] = [\hat{y}\hat{p}_z, \hat{p}_z] - [\hat{z}\hat{p}_y, \hat{p}_z] = \hat{y}[\hat{p}_z, \hat{p}_z] + [\hat{y}, \hat{p}_z]\hat{p}_z - \hat{z}[\hat{p}_y, \hat{p}_z] - [\hat{z}, \hat{p}_z]\hat{p}_y = -i\hbar\hat{p}_y$ なので、

$[\hat{L_x}, \hat{p}_z{}^2] = \hat{p}_z[\hat{L_x}, \hat{p}_z] + [\hat{L_x}, \hat{p}_z]\hat{p}_z = \hat{p}_z(-i\hbar\hat{p}_y) + (-i\hbar\hat{p}_y)\hat{p}_z = -2i\hbar\hat{p}_y\hat{p}_z$　⋯ (4)

(2)(3)(4)式から　$[\hat{L_x}, \hat{p}^2] = [\hat{L_x}, \hat{p}_x{}^2] + [\hat{L_x}, \hat{p}_y{}^2] + [\hat{L_x}, \hat{p}_z{}^2] = 0 + 2i\hbar\hat{p}_y\hat{p}_z - 2i\hbar\hat{p}_y\hat{p}_z = 0$　⋯(5)

次に、$[\hat{L_x}, \hat{V(r)}]$を調べる。

講義ノート(6-3-14)式より $\hat{L_x}$ はθ, ϕ のみに依存する。$\hat{V}(r)$ はr のみの関数なので、(6-3-14)式を使い、$[\hat{L_x}, \hat{V(r)}]\varphi(r, \theta, \phi)$ を計算するとゼロになるので、$[\hat{L_x}, \hat{V(r)}] = 0$　⋯(6)

結局、(1)(5)(6)式より $[\hat{L_x}, \hat{H}] = \dfrac{1}{2m}[\hat{L_x}, \hat{p}^2] + [\hat{L_x}, V(r)] = 0 + 0 = 0.$ が得られた。

同様にして、$[\hat{L_y}, \hat{p}^2] = 0$、$[\hat{L_z}, \hat{p}^2] = 0$、$[\hat{L_y}, \hat{V(r)}] = 0$、$[\hat{L_z}, \hat{V(r)}] = 0$ となるので、$[\hat{L_x}, \hat{H}] = [\hat{L_y}, \hat{H}] = [\hat{L_z}, \hat{H}] = 0$ が証明される。

3.　$\hat{p}_r \to -i\hbar\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}r$ を導入し、$\hat{L}^2 \to -\hbar^2\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right]$ を使うと中心力ポテンシャルのハミルトニアンは

$\hat{H} = \frac{\hat{p}_r{}^2}{2\mu} + \frac{\hat{L}^2}{2\mu r^2} + \hat{V}(r)$ と書けることを示せ。

（解答例）

$$\frac{\hat{p}_r{}^2}{2\mu} = \frac{1}{2\mu}\left(-i\hbar\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}r\right)\left(-i\hbar\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}r\right) = \frac{-\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}r\right) = \frac{-\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}r \qquad \cdots(*)$$

$\mu \sim m$ なので、(7-2-12）式において、$\hat{L}^2 \to -\hbar^2\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right]$の置き換えを行い、両辺を$Y_l^m(\theta,\phi)$で割ると、

$\hat{H}R_{El}(r) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}r + \frac{\hat{L}^2}{2mr^2} + V(r)\right]R_{El}(r) = ER_{El}(r)$ となる。　　(*)式を使うと、$\hat{H} = \frac{\hat{p}_r{}^2}{2\mu} + \frac{\hat{L}^2}{2\mu r^2} + \hat{V}(r)$ が得られる。

（参考） $\hat{p}_r \to -i\hbar\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}r$ は動径方向の極座標での運動量演算子と考えられる。したがって、$\frac{\hat{p}_r{}^2}{2\mu}$は 動径方向の運動エネルギー、$\frac{\hat{L}^2}{2\mu r^2} + \hat{V}(r)$ は有効ポテンシャルと考えられる。（古典力学を復習せよ）

4.　$\varphi_{E,l,m}(r,\theta,\phi) = R(r)Y_l^m(\theta,\phi)$を球ポテンシャルのSchrödinger方程式(7-2-9)に代入し、$R(r)$の満たす動径方向の方程式(7-2-14)を求めなさい。（手順は本文に書いてある）**（解答）**略。

5.　極座標でのラプラシアンの式(7-2-15)(7-2-16)(7-2-17)がすべて等しいことを確かめよ。**（解答）**略。

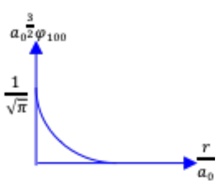
6.　水素原子の$n = 4$ の場合の量子状態を125頁（7-3-2節）の表に追加しなさい。
（解答例）

n			4	
l	0	1	2	3
分光学における記法	4s	4p	4d	4f
m	0	-1, 0, +1	-2, -1, 0, +1, +2	-3, -2, -1, 0, +1, +2, +3
l に対する縮退	1	3	5	7
n に対する縮退			16(=4^2)	

7. 水素原子の基底状態の波動関数は $\varphi_{100} = Ae^{-r/a_0}$ である。これを水素原子のSchrödinger方程式に代入し、基底状態のエネルギーE_1 と a_0 を求めよ。**（解答）**略。

8. 水素原子の基底状態の波動関数 φ_{100} と動径方向の確率密度分布 $r^2|\varphi_{100}|^2$ を図示し、ボーア半径a_0 の物理的意味を述べよ。
（解答例）

講義ノートp127の下部の表より $\varphi_{100} = \frac{1}{\sqrt{\pi}}a_0^{-\frac{3}{2}}e^{-r/a_0}$ （右図）



$r^2|\varphi_{100}|^2 = A^2r^2e^{-2r/a_0}$　（p127の図（下段の一番上（n=1, l=0）のグラフを見よ）

$r = a_0$ の時、$r^2|\varphi_{100}|^2$ は最大値をとる（p127の図）。よって、ボーア半径a_0 は水素原子の大きさの目安となる。