[複習]

$$\underbrace{\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(r)\right.}_{= H} - E\Big)\psi(\mathbf{r}) = 0$$

$$\psi(\mathbf{r}) = R_\ell(r)\,Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}})$$

$\downarrow$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + V(r) + \frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2mr^2} - E\right)R_\ell(r) = 0$$

$$R_\ell(r) = \frac{u_\ell(r)}{r}$$

規格化

$$1 = \int_0^\infty r^2 dr\,|R_\ell(r)|^2 = \int_0^\infty dr\,|u_\ell(r)|^2$$

$\downarrow$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dr^2} + V(r) + \frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2mr^2} - E\right)u_\ell(r) = 0$$

$u_\ell(r) \sim r^{\ell+1}$, $\cancel{r^{-\ell}}$ $(r \sim 0)$

$R_\ell(r) \sim r^\ell$ ← $\ell=0$ のときのみ $r=0$ で値をもつ

自由粒子 $(V=0)$

$R_\ell(r) \sim j_\ell(kr)$, $\cancel{n_\ell(kr)}$

$\qquad \wr \qquad\qquad \wr$

$\qquad \dfrac{r^{\ell+1}}{r} \qquad \dfrac{r^{-\ell}}{r}$

(note) $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} = e^{ikr\cos\theta} = \sum_{\ell=0}^{\infty} A_\ell \boxed{P_\ell(\cos\theta)}$ ルジャンドル多項式で展開可

$$A_\ell = (2\ell+1)\,i^\ell\,j_\ell(kr)$$

De artme t F
To l

3.3. 無限に高い球対称井戸

$$V(r) = \begin{cases} 0 & r < a \\ \infty & r > a \end{cases}$$

$r<a$ は自由粒子と同じ

→ 原点で正則な解は

$$R_\ell(r) = A_\ell \cdot j_\ell(kr)$$

↑

規格化因子

$r>a$ で $V(r)=\infty$

↓

$$R_\ell(r=a) = 0$$

⇒ $j_\ell(ka)=0$ を満たす k のみが許される。

例) $\ell=0$ のとき

$$j_0(ka) = \frac{1}{ka}\sin(ka) = 0$$

⇒ $ka = n\pi$

⇒ $E = \frac{k^2\hbar^2}{2m} = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$

※ 1次元ポテンシャル

$$V(x) = \begin{cases} 0 & (0 \leq x \leq a) \\ \infty & (\text{それ以外}) \end{cases}$$

と同じ

球ハンケル関数　$h_\ell^{(\pm)}(kr) \equiv j_\ell(kr) \pm i n_\ell(kr) \to \pm \frac{1}{ikr} e^{\pm i(kr - \frac{\ell\pi}{2})}$

3.4. 井戸型ポテンシャル（$E<0$ の場合）

$$V(r) = \begin{cases} -V_0 & r \leq a \\ 0 & r > a \end{cases}$$

簡単のため $\ell=0$ に限ると

$r<a$ では　$u_0(r) = A\sin(\tilde{k}r)$　　$E + V_0 = \frac{\tilde{k}^2\hbar^2}{2m}$

$r>a$ では

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dr^2} - E\right) u_0(r) = 0$$

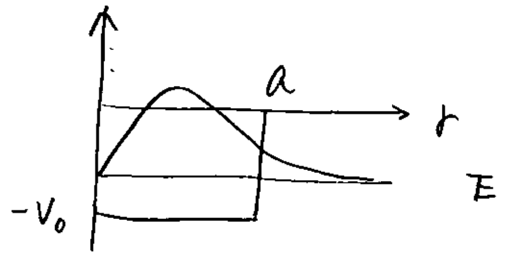
$$\downarrow$$

$$u_0(r) = B e^{-\kappa r}$$

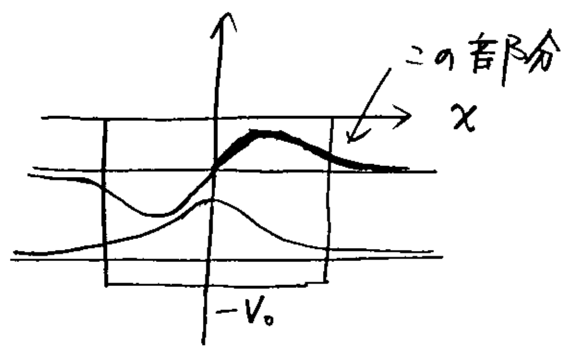
$$\left(E = -\frac{\kappa^2\hbar^2}{2m}\right)$$

（※ 一般の ℓ では 球ベッセル関数 $j_\ell(\tilde{k}r)\cdot\tilde{k}r$ と 球ハンケル関数 $h_\ell^{(+)}(i\kappa r)\cdot\kappa r$ ）

波動関数：



(note) この波動関数は 1次元井戸型ポテンシャルの励起状態の形に相当



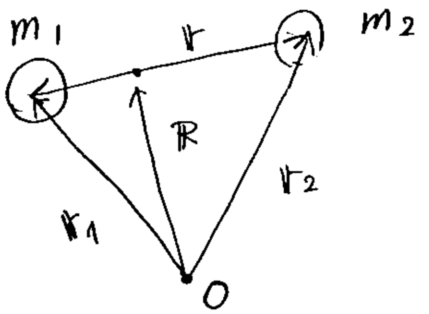
∿ 3次元ポテンシャルは井戸がある程度深くないと束縛状態を持たない

↔ 1次元ポテンシャルと大きく違うところ
（1次元ポテンシャルは引力であれば必ず束縛状態を持つ）

4. 水素原子（束縛状態）

4.1. 2粒子系：重心運動と相対運動

$$H = \frac{\mathbb{P}_1^2}{2m_1} + \frac{\mathbb{P}_2^2}{2m_2} + V(\mathbb{r}_1, \mathbb{r}_2)$$



重心座標 $\mathbb{R} = \dfrac{m_1\mathbb{r}_1 + m_2\mathbb{r}_2}{m_1 + m_2}$

相対座標 $\mathbb{r} = \mathbb{r}_1 - \mathbb{r}_2$

を導入.

・ $\mathbb{R}, \mathbb{r}$ に共役な運動量？

$$\mathbb{P} = \alpha\, \mathbb{P}_1 + \beta\, \mathbb{P}_2$$

$$\rightarrow \quad [\mathbb{R}, \mathbb{P}] = \left(\frac{m_1}{M}\alpha + \frac{m_2}{M}\beta\right)\cdot i\hbar \qquad (M = m_1 + m_2)$$

$$[\mathbb{r}, \mathbb{P}] = (\alpha - \beta)\cdot i\hbar$$

$[\mathbb{R}, \mathbb{P}] = i\hbar$, $[\mathbb{r}, \mathbb{P}] = 0$ となるように
α, β を決めると $\alpha = \beta = 1$
すなわち $\mathbb{P} = \mathbb{P}_1 + \mathbb{P}_2$ （全運動量）

同様に $\mathbb{p} = \alpha' \mathbb{P}_1 + \beta' \mathbb{P}_2$ として

$$[\mathbb{R}, \mathbb{p}] = 0, \quad [\mathbb{r}, \mathbb{p}] = i\hbar$$

となるように α', β' を選ぶと

Department of Physics
Tohoku University

$$\begin{cases} \alpha' - \beta' = 1 \\ m_1 \alpha' + m_2 \beta' = 0 \end{cases} \longrightarrow \qquad \begin{aligned} \alpha' &= -\frac{m_2}{m_1}\beta' \\ \left(-\frac{m_2}{m_1} - 1\right)\beta' &= 1 \\ \beta' &= -\frac{m_1}{M} \\ \alpha' &= +\frac{m_2}{M} \end{aligned}$$

$$\therefore \quad \mathbf{p} = \frac{m_2}{M}\mathbf{p}_1 - \frac{m_1}{M}\mathbf{p}_2$$

(note)

$$\begin{pmatrix} \mathbb{P} \\ \mathbf{p} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ \frac{m_2}{M} & -\frac{m_1}{M} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{p}_1 \\ \mathbf{p}_2 \end{pmatrix}$$

$$\downarrow$$

$$\begin{pmatrix} \mathbf{p}_1 \\ \mathbf{p}_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ \frac{m_2}{M} & -\frac{m_1}{M} \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} \mathbb{P} \\ \mathbf{p} \end{pmatrix} = -\begin{pmatrix} -\frac{m_1}{M} & -1 \\ -\frac{m_2}{M} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbb{P} \\ \mathbf{p} \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} \frac{m_1}{M}\mathbb{P} + \mathbf{p} \\ \frac{m_2}{M}\mathbb{P} - \mathbf{p} \end{pmatrix}$$

$$\therefore$$

$$H = \frac{1}{2m_1}\left(\frac{m_1}{M}\mathbb{P} + \mathbf{p}\right)^2 + \frac{1}{2m_2}\left(\frac{m_2}{M}\mathbb{P} - \mathbf{p}\right)^2 + V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$$

$$= \frac{1}{2}\left(\frac{m_1}{M^2} + \frac{m_2}{M^2}\right)\mathbb{P}^2 + \frac{1}{2}\left(\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2}\right)\mathbf{p}^2 + \left(\frac{1}{M} - \frac{1}{M}\right)\mathbb{P}\cdot\mathbf{p} + V$$

$$= \frac{\mathbb{P}^2}{2M} + \frac{\mathbf{p}^2}{2\mu} + V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$$

$$\mu = \left(\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2}\right)^{-1} \qquad (換算質量)$$

Department of Physics
Tohoku University

もし ポテンシャル V が $\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$ のみの関数だとしたら重心運動と相対運動は完全に分離：

$$H = \underbrace{\frac{\mathbf{P}^2}{2M}}_{=H_{cm}} + \underbrace{\frac{\mathbf{p}^2}{2\mu} + V(\mathbf{r})}_{=H_{rel}}$$

"自由粒子"

全系の波動関数は $\Psi(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = \psi(\mathbf{r})\, e^{i\mathbf{P}\cdot\mathbf{R}/\hbar}$

$\psi(\mathbf{r})$ は

$$\left[\frac{\mathbf{p}^2}{2\mu} + V(\mathbf{r})\right]\psi(\mathbf{r}) = \underbrace{\left(E_{tot} - \frac{\mathbf{P}^2}{2M}\right)}_{=E_{cm}}\psi(\mathbf{r})$$

に従う。

（重心固定系でのエネルギー）

(note)
$$\mathbf{p} = \mu\dot{\mathbf{r}} = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}(\dot{\mathbf{r}}_1 - \dot{\mathbf{r}}_2)$$
$$= \frac{1}{M}(m_2 \cdot m_1\dot{\mathbf{r}}_1 - m_1 \cdot m_2\dot{\mathbf{r}}_2)$$
$$= \frac{1}{M}(m_2\mathbf{p}_1 - m_1\mathbf{p}_2)$$