量子力学 2 演習　　No.6　98/5/21

1. 中心力場の Schrödinger 方程式

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)+U(r)\right\}\Psi(x,y,z)=E\Psi(x,y,z)$$

を考える。$r=\sqrt{x^2+y^2+z^2}$ である。以下の問いに答えよ。

(1) 極座標 $x=r\cos\varphi\sin\theta,\quad y=r\sin\varphi\sin\theta,\quad z=r\cos\theta$ を導入する。偏微分係数

$$\frac{\partial r}{\partial x},\ \frac{\partial r}{\partial y},\ \frac{\partial r}{\partial z},\ \frac{\partial\theta}{\partial x},\ \frac{\partial\theta}{\partial y},\ \frac{\partial\theta}{\partial z},\ \frac{\partial\varphi}{\partial x},\ \frac{\partial\varphi}{\partial y},\ \frac{\partial\varphi}{\partial z}$$

の極座標表示を計算せよ。

(2) (1) の結果を使って、微分演算子

$$\frac{\partial}{\partial x},\ \frac{\partial}{\partial y},\ \frac{\partial}{\partial z}$$

の極座標表示を書け。

(3) (2) の結果を使って、中心力場の Schrödinger 方程式の極座標表示を求めよ。

(4) Ψ を $\Psi(r,\theta,\varphi)=R(r)Y(\theta,\varphi)$ と変数分離した時、$R(r)$ が満たす方程式を導け。さらに、$Y(\theta,\varphi)$ が方程式

$$\frac{\partial^2 Y}{\partial\theta^2}+\cot\theta\frac{\partial Y}{\partial\theta}+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2 Y}{\partial\varphi^2}+l(l+1)Y=0$$

を満たすことを示せ。ただし、l は定数。

2. 問題 1 では、解の角度部分 $Y(\theta,\varphi)$ が満たす方程式が導かれた。それについて以下の問いに答えよ。

(1) 変数分離 $Y(\theta,\varphi)=\Theta(\theta)\Phi(\varphi)$ を行い、$\Theta(\theta),\Phi(\varphi)$ が満たす方程式を導け。

(2) $\Phi(\varphi)$ が満たす方程式を解け。$\Phi(\varphi)$ が一価関数であることから何がわかるか。

(3) 変数変換 $x=\cos\theta$ を行い、$\Theta(x)$ が Legendre の陪微分方程式

$$(1-x^2)\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\Theta(x)-2x\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\Theta(x)+\left\{l(l+1)-\frac{m^2}{1-x^2}\right\}\Theta(x)=0$$

を満たすことを示せ。ただし、m は整定数。

(4) Legendre 多項式

$$P_l(x)=\frac{1}{2^l l!}\frac{\mathrm{d}^l}{\mathrm{d}x^l}(x^2-1)^l$$

が Legendre の微分方程式

$$(1-x^2)\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}P_l(x)-2x\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}P_l(x)+l(l+1)P_l(x)=0$$

を満たすことから、Legendre 陪関数

$$P_l^m(x)=(1-x^2)^{m/2}\frac{\mathrm{d}^m}{\mathrm{d}x^m}P_l(x)$$

は Legendre の陪微分方程式を満たすことを示せ。これによって、解の角度部分が $Y_l^m(\theta,\varphi)=N_l^m P_l^m(\cos\theta)\mathrm{e}^{im\varphi}$ で与えられることがわかる。これを球面調和関数と呼ぶ。N_l^m は規格化定数である。

3. 角運動量ベクトル $\mathbf{L}$ の各成分は、

$$L_x=\frac{\hbar}{i}\left(y\frac{\partial}{\partial z}-z\frac{\partial}{\partial y}\right),\quad L_y=\frac{\hbar}{i}\left(z\frac{\partial}{\partial x}-x\frac{\partial}{\partial z}\right),\quad L_z=\frac{\hbar}{i}\left(x\frac{\partial}{\partial y}-y\frac{\partial}{\partial x}\right)$$

で与えられる。これについて以下の問いに答えよ。

(1) 問題 1 の (2) の結果を使って、$L_x,\ L_y,\ L_z$ の極座標表示を求めよ。

(2) $L^2=L_x^2+L_y^2+L_z^2$ の極座標表示を計算せよ。

(3) 問題 2 で求めた球面調和関数 $Y_l^m(\theta,\varphi)$ が L^2 と L_z の同時固有状態になっていることを示し、固有値を求めよ。