１１章　He 原子（Ⅱ）

課題１

(5)式は$0 < Z < 27/8$の範囲の波動関数であれば$E < 0$となる。即ち、He 周辺の２個の電子はバラバラな状態よりも He 原子核周辺に拘束されたほうが安定であることを示している。一方、$Z \leq 0$では波動関数が全空間に広がってしまうので He 原子核の電荷($+2e$)と電子の電荷($-e$)とのクーロン引力による安定化が得られない。では、$Z \geq 27/8$であるような波動関数は何故に不安定($E \geq 0$)になるのだろうか。下線部と同程度の詳しさで定性的理由を述べよ。

Zが大きいと波動関数が原子核近傍に収縮し、運動エネルギーと２電子間クーロン反発ポテンシャルが増加し、電子と原子核とのクーロン引力ポテンシャルの増加を凌駕する。

(波動関数の式中のZは波動関数の広がりを表現している。エネルギー演算子の中のZは He ですから$Z = 2$で固定です)

課題２

本章の導出を参考にして水素原子核(プロトン)周辺に電子が２個存在する状態、即ち H^-の状態、が安定に存在するかどうかを推測せよ。

H^-の波動関数を次式とする。

$$\Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \phi_{100}(\mathbf{r}_1)\phi_{100}(\mathbf{r}_2)$$

$$= \frac{1}{\pi}\left[\frac{1}{r_B}\right]^3 e^{-r_1/r_B} e^{-r_2/r_B}$$

水素原子の波動関数にαとβの電子が計２個占有しているとする(スピン関数は省略)。

このときの全エネルギーは、水素原子のエネルギーの２倍に電子間クーロン反発ポテンシャルを加えた形となる。

$$E = -\frac{1}{2}\frac{m_e e^4}{(4\pi\varepsilon_0)^2\hbar^2} \times 2 + \frac{5}{8}\frac{m_e e^4}{(4\pi\varepsilon_0)^2\hbar^2} = -\frac{3}{8}\frac{m_e e^4}{(4\pi\varepsilon_0)^2\hbar^2}$$

従って、安定化する。波動関数中のZを調節すれば更にエネルギーは低下する。

課題３

陽電子は、質量は電子と同じ、電荷は電子と逆符合$+e$を持つ粒子である。電子と陽電子が対となって存在する状態は、電子とプロトンが対となって存在する状態(つまり水素原子)とほとんど同等なシュレーディンガー方程式を解くことによって得られる。つまり換算質量が異なるだけである(←これはホボこの問題の答えである)。電子－陽電子の対を、陽電子と電子がバラバラになった状態にするために必要なエネルギーを計算せよ。

水素原子系の換算質量μはプロトンの質量が圧倒的に大きいので$\mu \approx m_e$である。

電子－陽電子系の換算質量は

$$\mu \approx \frac{m_e m_e}{m_e + m_e} = \frac{m_e}{2}$$

である。これを水素原子のエネルギーの式に代入すればよい。

課題４

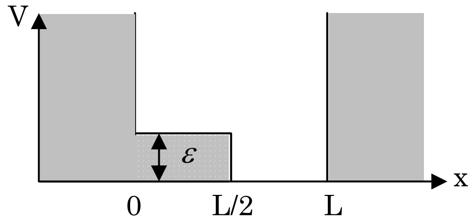
長さ L の１次元空間を粒子(質量 m)が自由に運動する「１次元箱型ポテンシャル」の問題を考える。波動関数とエネルギーは次式である。

$$\phi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n\pi}{L} x, \qquad e_n = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2mL^2} = \frac{h^2 n^2}{8mL^2} \qquad (n = 1, 2, 3, \cdots) \qquad \text{(a)}$$

(注)問題を解く際には、e_1, e_2 の値は最後まで代入しない方が賢明である。

次に、ポテンシャルの関数形を次式のように変形した場合を考える。

$$V(x) = \begin{cases} \infty & (x < 0) \\ \varepsilon & (0 \le x \le \frac{L}{2}) \\ 0 & (\frac{L}{2} \le x \le L) \\ \infty & (x > L) \end{cases}$$



このポテンシャル $V(x)$ でのシュレーディンガー方程式の解を E_n と ψ_n $(n = 1, 2, 3, \cdots)$ とする。$\varepsilon > 0$ の絶対値は十分に小さく、$\{E_n, \psi_n\}$ は $\{e_n, \phi_n\}$ と $n = 1, 2, 3, \cdots$ の順番で１対１対応する。但し、$E_1 < E_2 < E_3 < \cdots$ とする。以下の誘導に従って、E_1, ψ_1 を変分法と摂動法で近似的に求めてみよう。

変分法による解法

(1) ポテンシャル $V(x)$ 中を運動する粒子(質量 m)の Schrödinger 方程式を、$V(x)$ を使って以下の形式で書け。

$$\hat{H}\psi(x) = E\psi(x)$$

$$\hat{H} \equiv \boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)}$$

(2) 試行関数を次式とする。このとき、ψ_1 が規格化されていることを示せ。

$$\psi_1(x; c_1, c_2) = \frac{[c_1\phi_1(x) + c_2\phi_2(x)]}{\sqrt{c_1^2 + c_2^2}}$$

$\int \psi_1(x; c_1, c_2)^* \psi_1(x; c_1, c_2) dx = 1$ を示せばよい。実数の範囲で、という但し書きを付けなかったので c_1^2 と $c_1^* c_1$ にやや混乱があるがご容赦ください。

(3) 次式からエネルギーを求めよ（積分公式は最終項にある）。

$$E_1(c_1, c_2) = \int_0^L \psi_1^*(x; c_1, c_2) \hat{H} \psi_1(x; c_1, c_2) dx = \frac{\boxed{}}{c_1^2 + c_2^2}$$

上式を次のように変形しておく。

$$(c_1^2 + c_2^2)E_1(c_1, c_2) = \boxed{}$$

先ず、以下の積分を計算する。

$$\int \psi_1(x)\hat{H}\psi_1(x)dx = \int \psi_1(x)\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\right]\psi_1(x)dx + \int \psi_1(x)V(x)\psi_1(x)dx$$

$$= e_1 + \int_0^{L/2} \psi_1(x)\varepsilon\psi_1(x)dx = e_1 + \frac{\varepsilon}{2}$$

$$\int \psi_2(x)\hat{H}\psi_2(x)dx = \int \psi_2(x)\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\right]\psi_2(x)dx + \int \psi_2(x)V(x)\psi_2(x)dx$$

$$= e_2 + \int_0^{L/2} \psi_2(x)\varepsilon\psi_2(x)dx = e_2 + \frac{\varepsilon}{2}$$

$$\int \psi_1(x)\hat{H}\psi_2(x)dx = \int \psi_1(x)\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\right]\psi_2(x)dx + \int \psi_1(x)V(x)\psi_2(x)dx$$

$$= \int \psi_1(x)V(x)\psi_2(x)dx = \varepsilon\int_0^{L/2} \psi_1(x)\psi_2(x)dx$$

$$= \frac{2\varepsilon}{L}\int_0^{L} \sin\frac{\pi x}{L}\sin\frac{2\pi x}{L}dx = \frac{2\varepsilon}{L}\frac{L}{4} = \frac{\varepsilon}{2}$$

以上より箱の中は、

$$\boxed{c_1^2(e_1 + \frac{\varepsilon}{2}) + c_2^2(e_2 + \frac{\varepsilon}{2}) + 2c_1c_2\frac{\varepsilon}{2}}$$

以下省略。

(4) 直上の式を c_1, c_2 でそれぞれ偏微分して、次式の条件を代入して c_1, c_2, E_1 を決める。

$$\frac{\partial E_1(c_1, c_2)}{\partial c_1} = 0 \text{、} \qquad \frac{\partial E_1(c_1, c_2)}{\partial c_2} = 0$$

そのときに、以下のような c_1, c_2 の連立方程式を得るはずである。箱内の式と E_1 の式を示せ。

$$(\boxed{} - E_1)c_1 \quad + \quad \boxed{}\; c_2 = 0$$

$$\boxed{}\; c_2 \quad + \quad (\boxed{} - E_1)c_2 = 0$$

斉次連立方程式(定数項が全部ゼロの連立方程式)が有意な解を持つためには係数行列の行列式がゼロでなければならない。即ち次式である。

$$\begin{vmatrix} \boxed{} - E_1 & \boxed{} \\ \boxed{} & \boxed{} - E_1 \end{vmatrix} = 0$$

(5) 上式から E_1 を計算せよ。次に $e_2 - e_1 >> \varepsilon$ であると仮定して、$\sqrt{1+x} \approx 1 + x/2$ を使って E_1 の近似式を示せ。

(6) 上の(1)～(4)の手順で、２番目のエネルギーの解 E_2, ψ_2 を求めることができるか。可能ならその式を、困難ならその理由を示せ。

摂動法による解法

(7)　２次の摂動論により E_1 を、１次の摂動論により ψ_1 を求め、それぞれ式で示せ。

(8)　上問(7)式で ϕ_1、ϕ_2、e_1、e_2 だけを使い、$n \geq 3$ の無摂動系の解を無視した場合には、この式は上問(5)の近似式と全く同じ式であることを示せ。

積分公式：$\int_0^{L/2} \phi_1(x)\phi_1(x)dx = \frac{1}{2}$,　$\int_0^{L/2} \phi_1(x)\phi_2(x)dx = \frac{4}{3\pi}$、