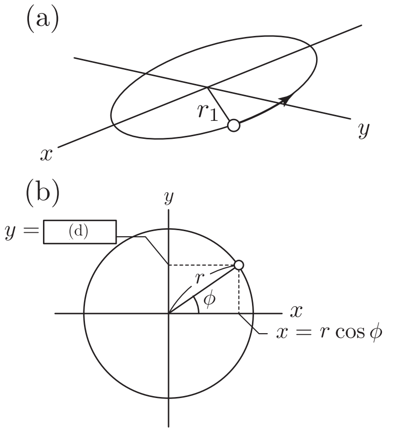
科　目　名	学年	番号	学　籍　番　号	氏　　　　名
量子力学 I　第 7 回	2			

全問解答し，答え合わせ（自己採点）をして提出せよ。　　　　**授業時間外の学習時間：_____時間_____分**

[1] 「詳解　量子化学の基礎」の 4 章（46 頁〜53 頁）を読みなさい。



[2] 上図 (a) に示したように，原点を中心として半径 r_1 の円周上を運動する粒子を想定する。この場合，次式で表すポテンシャルを考えれば，粒子は半径 r_1 の円周上だけで運動し，これ以外の場所に飛び出していかない。

$$U(x) = \begin{cases} 0 & \text{ただし，} \boxed{\quad (a) \quad} = r_1^2 \text{ を満たす点} \\ \infty & \text{ただし，} \boxed{\quad (a)\ \text{再出} \quad} = r_1^2 \text{ 以外の点} \end{cases} \tag{1}$$

回転運動を取り扱う場合には，直交座標を用いるよりも**極座標**（きょくざひょう）を用いる方が Schrödinger 方程式を簡潔に記述できる。上図 (b) に 2 次元の極座標を示した。2 次元の極座標では，任意の点の座標を原点からの距離を表す $\boxed{\quad (b) \quad}$ r と x 軸と $\boxed{\quad (b)\ \text{再出} \quad}$ とのはさむ角，すなわち，$\boxed{\quad (c) \quad}$ 角 ϕ を用いて $(r,\ \phi)$ と表す。

極座標 $(r,\ \phi)$ と直交座標 $(x,\ y)$ は，

$$x = r\cos\phi \qquad y = \boxed{\quad (d) \quad} \tag{2}$$

という関係で結ばれる。この極座標を用いれば，(1) 式のポテンシャル U は，

$$U(\phi) \quad = \quad \begin{cases} 0 & \text{ただし，} r = r_1 \\ \infty & \text{ただし，} r \neq r_1 \end{cases} \tag{3}$$

と簡単になる。また，1 次元の問題と同様に，粒子の存在しない場所（ポテンシャルが無限に大きい場所）で Schrödinger 方程式をたてても有用な情報が得られないから，$r = r_1$ だけで Schrödinger 方程式をたてれば十分である。つまり，変数 r は実質的に $\boxed{\quad (e) \quad}$ r_1 で置き換えられることになり，極座標を用いることにより，変数が 1 つ $\boxed{\text{(f) 減る or 増える}}$。これが直交座標ではなく極座標を用いる大きな理由の 1 つである。また，ここで考えている形のポテンシャルを $\boxed{\quad (g) \quad}$ 型ポテンシャルとよぶ。

[3] 波動関数を Φ で表す。直交座標での Schrödinger 方程式，

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \boxed{\ (h)\ }\right) + U(x,y)\right]\Phi(x,y) = E\Phi\,(x,y) \tag{4}$$

に，(2) 式を代入し，r を定数として扱えば，極座標系における Schrödinger 方程式が次のように得られる（ただし，微分演算子の書き換えが少々面倒だから，そう簡単にはいかないので，細かい導出は省略する）。

$$-\frac{\hbar^2}{2\,(mr_1^2)}\frac{\mathrm{d}^2\Phi\,(\phi)}{\mathrm{d}\phi^2} \quad = \quad E\Phi\,(\phi) \tag{5}$$

ただし，問題 [2] で説明した理由で $U(r,\phi) = 0$ とした。

[4] ここで，mr_1^2 は回転運動する粒子の $\boxed{\quad\text{(i)}\quad}$ を表す。これを I と書き換えると，Schrödinger 方程式は,

$$-\frac{\hbar^2}{2I}\frac{\mathrm{d}^2\Phi(\phi)}{\mathrm{d}\phi^2} = E\Phi(\phi) \qquad (6)$$

となる。この式は,「$\boxed{\quad\text{(j)}\quad}$ ポテンシャル」の場合と全く同じだから $\Phi = A\sin(B\phi)$ が (6) 式の解であることは間違いないが，ここでは「2 回微分すると自分自身の定数倍になる関数」として，$\boxed{\quad\text{(k)}\quad}$ 関数 $e^{i\theta}$ を採用することにする。任意定数 A と m を含めて，具体的には,

$$\Phi = Ae^{im\phi} \qquad (7)$$

を用る。任意定数 A と m は 1 次元の問題と同様に「$\boxed{\quad(\ell)\quad}$ 条件」と「規格化条件」から定める。

[5] 円運動の $\boxed{\quad(\ell)\ \text{再出}\quad}$ 条件は,「ϕ と $\phi+2\pi$ で波動関数が同じ値をとる」である。これは ϕ と $\phi+2\pi$ が同じ点を表していることを考えればきわめて当たり前である。数式で表現すると $\Phi(\phi) = \Phi(\phi+2\pi)$ となる。これを具体的に書けば,

$$\begin{aligned} &Ae^{im\phi} = Ae^{im(\phi+2\pi)} && \\ &e^{im\phi} = e^{im\phi}e^{im2\pi} && \text{両辺を } A \text{ で割った} \\ &e^{im2\pi} = 1 && \text{両辺を } e^{im\phi} \text{で割った} \end{aligned} \qquad (8)$$

ここで $\boxed{\quad\text{(m)}\quad}$ の公式 $e^{i\theta} = \cos\theta + i\sin\theta$ を思い出そう。これから，$e^{i\theta} = 1$ が成り立つのは $\cos\theta = 1$，$\sin\theta = 0$ のときだけに限られるのは明らかである。これより，$\theta = 0, \pm 2\pi, \pm 4\pi, \cdots$ を得る。$\theta = 2m\pi$ であることに注意すれば,

$$\begin{aligned} 2m\pi &= 0, \pm 2\pi, \pm 4\pi, \cdots \\ m &= \boxed{\quad\text{(n)}\quad} \end{aligned} \qquad (9)$$

を得る。すなわち，m は正と負の整数に限定され，とびとびの値しか許されない。すなわち，m は $\boxed{\quad\text{(o)}\quad}$ である。

[6] 定数 A は規格化条件から以下のように定まる。

$$\begin{aligned} \int_0^{2\pi} |\Phi|^2 \mathrm{d}\phi &= \int_0^{2\pi} \Phi^*\Phi \mathrm{d}\phi \\ &= \int_0^{2\pi} \left(\boxed{\quad\text{(p) 具体的に}\quad} \cdot |A|e^{im\phi} \right) \mathrm{d}\phi \\ &= |A|^2 \int_0^{2\pi} \mathrm{d}\phi = |A|^2 \Big[\phi\Big]_0^{2\pi} \\ &= 2\pi|A|^2 = 1 \xrightarrow{\text{これより}} \quad A = \boxed{\quad\text{(q) 数値}\quad} \end{aligned} \qquad (10)$$

規格化定数には，位相因子を入れない約束だから，$A = 1/\sqrt{2\pi}$ とする（これ以降，位相因子については考えないことにする）。以上より，波動関数が以下のように求まった。

$$\Phi = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\phi} \qquad \text{ただし}, m = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots \qquad (11)$$

[7] 波動関数が得られたので，エネルギーを計算しよう。とりあえず，波動関数の 2 回微分をとっておこう。

$$\xrightarrow{(11)\ 式を微分すると} \quad \frac{\mathrm{d}\Phi}{\mathrm{d}\phi} = \boxed{\quad (\mathrm{r}) \quad} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\phi} \tag{12}$$

$$\begin{aligned} \xrightarrow{もう\ 1\ 回微分すると} \quad \frac{\mathrm{d}^2\Phi}{\mathrm{d}\phi^2} &= (im)^2 \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\phi} \\ &= -m^2 \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\phi} \\ &= -m^2 \Phi \end{aligned} \tag{13}$$

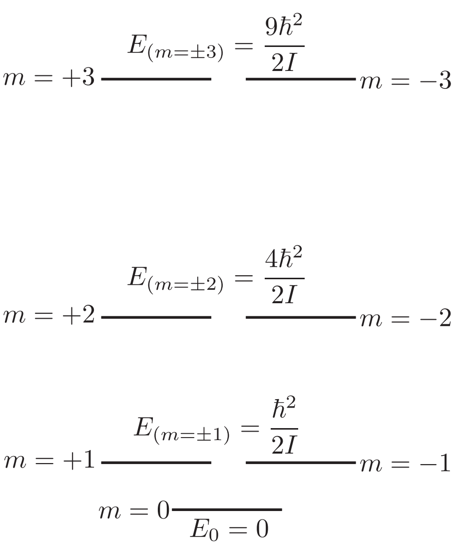
これを Schrödinger 方程式 (6) 式に代入すると，

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

$$\xrightarrow{両辺を\Phi で割ると} \quad E = \boxed{\ (\mathrm{s})\ } m^2 \tag{14}$$

ただし, $m = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots$

を得る。量子数 m が自乗の形 m^2 で入っていることに注目せよ。たとえば $m = 1$ の状態と $m = -1$ の状態が同じエネルギーをとる。これは，異なる状態が同じエネルギーを取っているから $\boxed{\quad (\mathrm{t}) \quad}$ の例になっている。



[8] 2 次元で回転運動する粒子の波動関数は，次のように表すことができた。

$$\Phi(\phi) \quad = \quad \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\phi} \qquad (15)$$

これは，次のハミルトニアンの固有関数である。

$$\hat{H} \quad = \quad -\frac{\hbar^2}{2I}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\phi^2} \qquad (16)$$

ところで，2 次元極座標において角運動量演算子は，

$$\hat{\ell}_z \quad = \quad -i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\phi} \qquad (17)$$

で与えられる。これを波動関数に作用させると次の結果を得る。

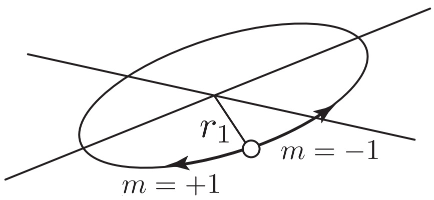
$$\begin{aligned}\hat{\ell}_z\Phi(\phi) &= -i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\phi}\left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\phi}\right) \\ &= -i\hbar\left(\boxed{\text{(u) 文字式}}\right)\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\phi} \quad \text{微分した} \\ &= \boxed{\text{(v) 整理して}}\,\Phi(\phi) \quad \text{整理した}\end{aligned} \qquad (18)$$

$\Phi(\phi)$ に $\hat{\ell}_z$ を作用させると $\Phi(\phi)$ の定数倍が得られた。これは，取りも直さず $\boxed{\text{(w) 文章中に既出}}$ 方程式である。すなわち，回転運動のエネルギー（ハミルトニアン）に関する固有関数 $\Phi(\phi)$ は，同時に角運動量演算子に関する固有関数でもあることがわかる。

ところで，量子力学では，「ある状態 ψ_i で古典物理量 F を測定すると，得られる**測定値**（そくていち）は演算子 $\hat{F}$ の**固有値**（こゆうち）f_i である」という要請をするから，状態 $\Phi(\phi) = e^{im\phi}/\sqrt{2}$ で粒子のエネルギーを測定すると，測定値として $\hbar^2 m^2/(2I)$ を得る。また，同じ状態で角運動量を測定すると測定値として $\boxed{\text{(v) 再出}}$ を得る。これは状態 $\Phi(\phi) = e^{im\phi}/\sqrt{2}$ でエネルギーと角運動量が同時に $\boxed{\text{(x)}}$ をとることを意味する。

ここで，ハミルトニアンと角運動量演算子をみると，これらは明らかに $\boxed{\text{(y)}}$ である（2 回微分してから 1 回微分するのと，1 回微分してから 2 回微分するのが違う結果を与えるわけがない）。この結果，ハミルトニアンと角運動量演算子に共通の $\boxed{\text{(z) 文章中に既出}}$ が存在することになる。これは次のように一般化できる。すなわち，古典物理量 F と G に対応する演算子 $\hat{F}$ と $\hat{G}$ が $\boxed{\text{(y) 再出}}$ ならば，$\hat{F}$ と $\hat{G}$ に共通の $\boxed{\text{(z) 再出}}$ が存在する。これは，F と G が同時に $\boxed{\text{(x) 再出}}$ をとることを意味する。

ところで，$m = 1$ と $m = -1$ の角運動量は，$\hbar$ と $-\hbar$ であり，これらは同じ大きさで符号だけが異なる[1]。今考えているのは「円運動」だから，角運動量が符号だけ異なるということは，これらの状態 $m = 1$ と $m = -1$ では回転の $\boxed{(\alpha)}$ が異なる（下図参照）。



[1] これより，換算プランク定数 $\hbar$ は角運動量の次元を有することがわかる。

[9] 2 次元で回転運動する粒子の状態は，$m = +1$ と $m = -1$，$m = +2$ と $m = -2$ のように量子数の絶対値が同じものどうしが同じエネルギーを示す。これを,「$m = +1$ と $m = -1$ の状態は縮退している」と言う。

ここでは，縮退している波動関数の線形結合について考える。そのため，波動関数を，

$$\begin{cases} \Phi_+(\phi) = \dfrac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\phi} & \text{ただし}, m = 1, 2, \cdots \\ \Phi_-(\phi) = \dfrac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-im\phi} & \text{ただし}, m = 1, 2, \cdots \end{cases} \tag{19}$$

と書き換える。ここで，$\Phi_+(\phi)$ と $\Phi_-(\phi)$ の足し算で新たな関数を定義する。

$$\begin{aligned} \Phi_a(\phi) &:= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\Phi_+(\phi) + \Phi_-(\phi)\right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left(e^{im\phi} + e^{-im\phi}\right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{\pi}} \underbrace{\frac{1}{2} \left(e^{im\phi} + e^{-im\phi}\right)}_{=\cos(m\phi)} \\ &= \frac{1}{\sqrt{\pi}} \cos(m\phi) \end{aligned} \tag{20}$$

はじめの $1/\sqrt{2}$ は規格化条件から定まる定数である。この新たな関数にハミルトニアンを作用させるとどんな結果を得るか見てみよう。

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2I} \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\phi^2} \Phi_a(\phi) &= -\frac{\hbar^2}{2I} \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\phi^2} \frac{1}{\sqrt{\pi}} \cos(m\phi) \\ &= -(\boxed{(\beta)\ \text{文字式}}) \frac{\hbar^2}{2I} \underbrace{\frac{1}{\sqrt{\pi}} \cos(m\phi)}_{=\Phi_a} \\ &= \boxed{(\gamma)\ \text{整理して}} \Phi_a \end{aligned} \tag{21}$$

Φ_a にハミルトニアンを作用させると Φ_a の定数倍が得られた。これは，取りも直さず $\boxed{(\mathrm{w})\ \text{再出}}$ 方程式である。また，その固有値 $\boxed{(\gamma)\ \text{再出}}$ はもとの波動関数 Φ_+ や Φ_- の固有値に等しい。これは,「縮退している波動関数の和からつくられる新たな関数も同じ固有値を持つ（すなわち，縮退している）」ことを示している。

[10] $\Phi_b(\phi) := B(\Phi_+(\phi) - \Phi_-(\phi))$ で定義される波動関数が Φ_+ や Φ_- と縮退していることを示せ。ただし，B は規格化定数である（これもきちんと求めよ)。

解答

[1] なし

[2] (a)：x^2+y^2 (b)：動径 (c)：方位 (d)：$r\sin\phi$ (e)：定数 (f)：減る
(g)：環状井戸

[3] (h)：$\dfrac{\partial^2}{\partial y^2}$

[4] (i)：慣性モーメント (j)：無限に深い井戸型 (k)：指数 (ℓ)：境界

[5] (m)：Euler（オイラー） (n)：$0, \pm 1, \pm 2, \cdots$ (o)： 量子数

[6] (p)：$|A|e^{-im\phi}$ (q)：$\pm\dfrac{1}{\sqrt{2}}e^{i\theta}$（ただし，ここで θ は位相を表す）

[7] (r)：im (s)：$\dfrac{\hbar^2}{2I}$ (t)：縮退

[8] (u)：im (v)：$m\hbar$ (w)：固有（値） (x)：確定値 (y)：可換 (z)：固有関数 (α)：向き

[9] (β)：$-m^2$ (γ)：$\dfrac{\hbar^2}{2I}m^2$

[10]

$$\Phi_b = \frac{B}{\sqrt{2\pi}}\left(e^{im\phi} - e^{-im\phi}\right) \qquad \Phi_b^* = \frac{B}{\sqrt{2\pi}}\left(e^{-im\phi} - e^{im\phi}\right) = -\Phi_b \tag{22}$$

からわかるように，$\Phi_b = -\Phi_b^*$ の関係にある。まずは，規格化定数 B を決定する。

$$\begin{aligned}
\int_0^{2\pi}\Phi_b\Phi_b^*\mathrm{d}\phi &= \int_0^{2\pi} -\Phi_b^2\mathrm{d}\phi = -\frac{B^2}{2\pi}\int_0^{2\pi}\left(e^{2im\phi} - 2 + e^{-2im\phi}\right)\mathrm{d}\phi && \text{(22) 式を代入した} \\
&= -\frac{B^2}{2\pi}\left[\frac{1}{2im}e^{2im\phi} - 2\phi - \frac{1}{2im}e^{-2im\phi}\right]_0^{2\pi} && \text{積分した} \\
&= -\frac{B^2}{2\pi}\left(\frac{1}{2im}e^{2im2\pi} - 4\pi - \frac{1}{2im}e^{-2im2\pi} - \left(\frac{1}{2im} - 0 - \frac{1}{2im}\right)\right) && 2\pi\text{と 0 を代入した} \\
&= -\frac{B^2}{2\pi}(-4)\pi = 2B^2 = 1 \quad \xrightarrow{\text{これより}} \quad B = \pm\frac{1}{\sqrt{2}} && \text{Euler の公式を用いた}
\end{aligned} \tag{23}$$

規格化定数が $B = 1/\sqrt{2}$ と求まったので，波動関数 Φ_b は次のように決まる。

$$\Phi_b = \frac{1}{\sqrt{2}}\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\left(e^{im\phi} - e^{-im\phi}\right) = \frac{i}{\sqrt{\pi}}\frac{1}{2i}\left(e^{im\phi} - e^{-im\phi}\right) = \frac{i}{\sqrt{\pi}}\sin(m\phi) \tag{24}$$

ここでもやはり波動関数を 2 回微分すると，

$$\begin{aligned}
\xrightarrow{\text{(24) 式を微分すると}} \quad \frac{\mathrm{d}\Phi_b}{\mathrm{d}\phi} = m\frac{i}{\sqrt{\pi}}\cos(m\phi) \xrightarrow{\text{もう 1 回微分すると}} \quad \frac{\mathrm{d}^2\Phi_b}{\mathrm{d}\phi^2} &= -m^2\frac{i}{\sqrt{\pi}}\sin(m\phi) \\
&= -m^2\Phi_b
\end{aligned} \tag{25}$$

を得る。これは (13) 式で Φ に対して得た結果とまったく同じである。すなわち，エネルギー E についても同じ結果 $E = \hbar^2 m^2/2I$：(14) 式を得るのは明らかである。

今日の講義でわからないことがあれば，お伝えください。また，講義にたいする要望があればお書きください。もちろん，成績等には一切関係ありません。

✎ **記述欄**