

2018 年度構造化学 (中田) quiz 7 回目略解

1. (状態が)縮退している。

2. 演算子を $\hat{A}$, その固有値を a としたとき $\hat{A}\psi_1 = a\psi_1, \hat{A}\psi_2 = a\psi_2$ となり、 ψ_1/ψ_2 は定数ではないとき、状態は縮退している、と呼ぶ。

3. $H\psi = E\psi$ をみたすとき、任意の複素数 a を両辺にかけると

$aH\psi = aE\psi \leftrightarrow Ha\psi = Ea\psi$ より。縮退の場合と違うのは、 ψ と $a\psi$ は定数倍だけ異なっていて、定数倍以上異なっているわけではないということ。

4.

4.1 $x = r \cos \theta, y = r \sin \theta (0 \leq r \leq \infty, 0 \leq \theta \leq 2\pi)$

4.2 $f(x, y)$ の $f(r, \theta)$ への変数変換で、

$$\frac{\partial}{\partial r} = \frac{\partial x}{\partial r} \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial y}{\partial r} \frac{\partial}{\partial y}$$
$$\frac{\partial}{\partial \theta} = \frac{\partial x}{\partial \theta} \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial y}{\partial \theta} \frac{\partial}{\partial y}$$

が成立するから、 $\frac{\partial x}{\partial r} = \cos \theta$ などを計算し(これわからない人は微積要復習)

$$\frac{\partial}{\partial r} = \cos \theta \frac{\partial}{\partial x} + \sin \theta \frac{\partial}{\partial y} \quad \text{および} \quad \frac{\partial}{\partial \theta} = -r \sin \theta \frac{\partial}{\partial x} + r \cos \theta \frac{\partial}{\partial y} \text{ を得る。}$$

4.3 直接計算するとすぐわかる。考えると自明だが綺麗な結果である。3次元以上でも逆行列を求めて二回作用させると二階偏微分が求まり、座標変換ができる。

$$\begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta \\ -r \sin \theta & r \cos \theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \theta & -\frac{\sin \theta}{r} \\ \sin \theta & \frac{\cos \theta}{r} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

5.

原子核は重いいため止まっているとする。このとき、電子の運動量項および陽子と電子のクーロン相互作用から Hamiltonian は成る。

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2\mu} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

水素原子の場合は偶然だが、慣性質量を用いると原子核が止まっていると見えるような系になっている。