[3]

原子は中心にある重い原子核と，原子核の作るポテンシャルに束縛された電子よりなる。ここでは原子を単純化した1次元のモデルを考える。一つの原子は古典的な原子核と一つの電子よりなり，原子核が位置 $x = x_0$ にあるとき，それが電子に与える影響は δ-関数型のポテンシャル

$$V(x) = -Z\delta(x - x_0) \tag{i}$$

によって表されるとする。Z は正の定数である。

電子の質量を m，プランク定数を 2π で割ったものを $\hbar$ とする。エネルギー固有値 E の定常状態にある電子の波動関数 $\psi(x)$ はシュレーディンガー方程式

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right)\psi(x) = E\psi(x) \tag{ii}$$

を満足する。

(1) 波動関数 $\psi(x)$ はいたるところ連続であるが，その微分係数 $\psi'(x) = d\psi(x)/dx$ は原子核の位置 $x = x_0$ において連続ではなく，次の接続条件を満足する。

$$\frac{\psi'(x_0 - 0)}{\psi(x_0)} - \frac{\psi'(x_0 + 0)}{\psi(x_0)} = 2k_0. \tag{iii}$$

ただし，$\psi'(x_0 \pm 0)$ は $\psi'(x)$ の $x \to x_0$ における極限として定義され，正の側から x を x_0 に近づけたものを $\psi'(x_0 + 0)$，負の側から x を x_0 に近づけたものを $\psi'(x_0 - 0)$ と表した。k_0 を $Z, m, \hbar$ を用いて表せ。

(2) 原子が一つだけであり，その原子核が原点 $x = 0$ にある場合を考える。電子の基底状態の波動関数 $\psi_0(x)$ と，そのエネルギー固有値 E_0 を求めよ。波動関数の規格化は問わない。解答には k_0 を用いてよい。

(3) 原子が二つある場合，すなわち原子核と電子が二つずつある場合を考える。ただし，電子同士の相互作用は考えない。二つの原子核の位置を $x = \pm a$ $(a > 0)$ とする。このとき二つの原子核が電子に与える影響はポテンシャル

$$V(x) = -Z\delta(x - a) - Z\delta(x + a) \tag{iv}$$

によって表される。パウリの排他律を考慮すると，二つの電子のエネルギーの合計が最も小さくなるのは，一つの電子が基底状態 ψ_1 に，もう一つの電子が第1励起状態 ψ_2 にあるときである。（電子のスピン自由度は無視する。）ψ_1 は x の偶関数であり，ψ_2 は x の奇関数である。a が十分大きいときには ψ_1 と ψ_2 はともにエネルギー固有値が負の束縛状態であるが，a をゆっくりと小さくしていくと，a がある値 a_0 になったところで ψ_2 のエネルギー固有

値は 0 になり，束縛状態ではなくなる。その結果，状態 ψ_2 にあった電子は原子から放出され，イオン化が起こる。a_0 を求めよ。解答には k_0 を用いてよい。

(4) 引き続き問 (3) で考えた二原子系を考える。電子の基底状態 ψ_1 は a の値によらず束縛状態である。$x \geq a$ における波動関数を $\psi_1(x) = e^{-k_1 x}$ としたとき，接続条件 (iii) が $x = \pm a$ において満足されるために k_1 と k_0 の間に成り立つべき関係式を求めよ。

(5) 問 (3) でイオン化が起こったあと，二つの原子を再びゆっくりと引き離す。二つの原子はイオン化したままであり，系はポテンシャル (iv) によって表される二つの原子核と，基底状態にある一つの電子よりなる。このとき $ak_0 \gg 1$ という近似を用い，二つの原子の間に働く力を求めよ。ただし，原子の間に働く力は原子核間の距離を変化させるために必要な仕事を用いて定義する。力が斥力であるか引力であるかを明記すること。解答には k_0 を用いてよい。