

化学第二 第2回

東京工業大学大学院
電子物理工学専攻

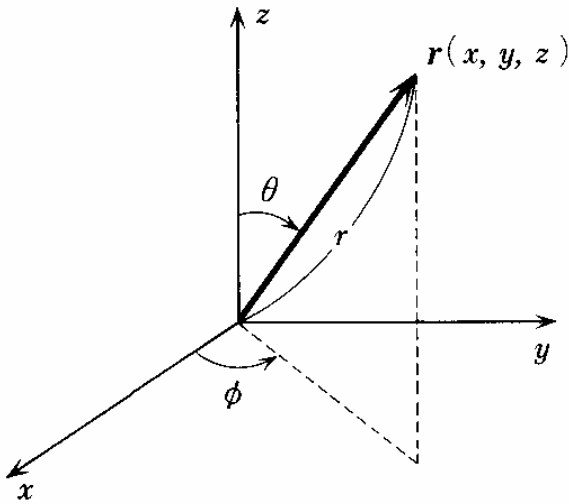
真島豊

2-0 本日のメニュー

「水素原子の波動関数の一般解」

- 2-1 水素原子の波動関数
- 2-2 主量子数 n , 方位量子数 l , 磁気量子数 m
- 2-3 シュレディンガー波動方程式の一般解の導出
(変数分離)
- 2-4 軌道角運動量の大きさと z 成分
- 2-5 水素原子の電子のエネルギー準位の縮退

2-1 水素原子の電子の波動関数



3次元極座標を (r, θ, ϕ) で表すと、
波動関数の一般解は

$$\Phi(r, \theta, \phi) = R_{n,l}(r) \Theta_{l,m}(\theta) \Phi_m(\phi)$$

と表される

極座標

$$0 \leq \theta \leq \pi$$

$$0 \leq \phi \leq 2\pi$$

$$R_{n,l}(r)$$

動経波動関数

$$\Theta_{l,m}(\theta)$$

$$\Phi_m(\phi)$$

角度依存を表す波動関数

体積素片

$$dv = (r \sin \theta \, d\phi) \times r \, d\theta \times dr$$

2-2 主量子数 n , 方位量子数 l , 磁気量子数 m

主量子数 $n=1,2,3,4,5$ (K,L,M,N,O殻)

- 殻構造を類別する量子数
- 主量子数でエネルギーが決まる
- 動径 r と関係

方位量子数 $l=0,1,2, \dots, (n-1)$ (s,p,d,f,g軌道)

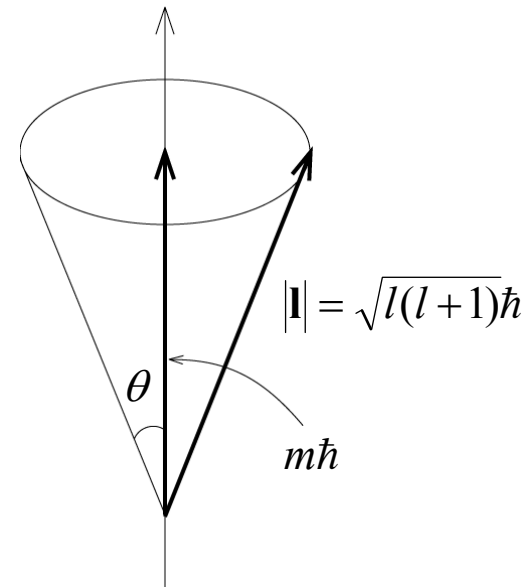
- 軌道角運動量の大きさを表す量子数 (形が決まる)
- θ と ϕ に関係
- 軌道角運動量の大きさ $\hbar\sqrt{l(l+1)}$

磁気量子数 $m=-l,-l+1, \dots, 0, \dots, l-1, l$ ($2l+1$ コ)

- 軌道角運動量の z 成分の大きさを表す量子数(軌道の向きが決まる)
- ϕ と関係

2-3 シュレディンガー波動方程式の一般解 の導出(変数分離)

2-4 角運動量の大きさとz成分



角運動量の大きさ $\sqrt{l(l+1)}\hbar$
角運動量 z成分 $m\hbar$

$$\sqrt{l(l+1)} \cos \theta = m$$

角運動量演算子ベクトル

$$\mathbf{l} = -j\hbar \begin{vmatrix} \mathbf{i} & \mathbf{j} & \mathbf{k} \\ x & y & z \\ \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} \end{vmatrix} = l_x \mathbf{i} + l_y \mathbf{j} + l_z \mathbf{k}$$

$$l_x = -j\hbar \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) = j\hbar \left(\sin \phi \frac{\partial}{\partial \theta} + \cot \theta \cos \phi \frac{\partial}{\partial \phi} \right)$$

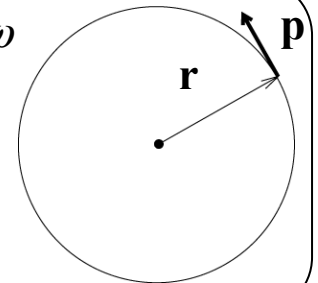
$$l_y = -j\hbar \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right) = j\hbar \left(-\cos \phi \frac{\partial}{\partial \theta} + \cot \theta \sin \phi \frac{\partial}{\partial \phi} \right)$$

$$l_z = -j\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) = -j\hbar \frac{\partial}{\partial \phi}$$

$$\mathbf{l}^2 \Theta_{l,m}(\theta) \Phi_m(\phi) = l(l+1)\hbar^2 \Theta_{l,m}(\theta) \Phi_m(\phi)$$

$$\mathbf{l}^2 = l_x^2 + l_y^2 + l_z^2 = -\hbar^2 \left\{ \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right\}$$

$$\mathbf{r} \times \mathbf{p} = mr^2 \omega = mvr$$



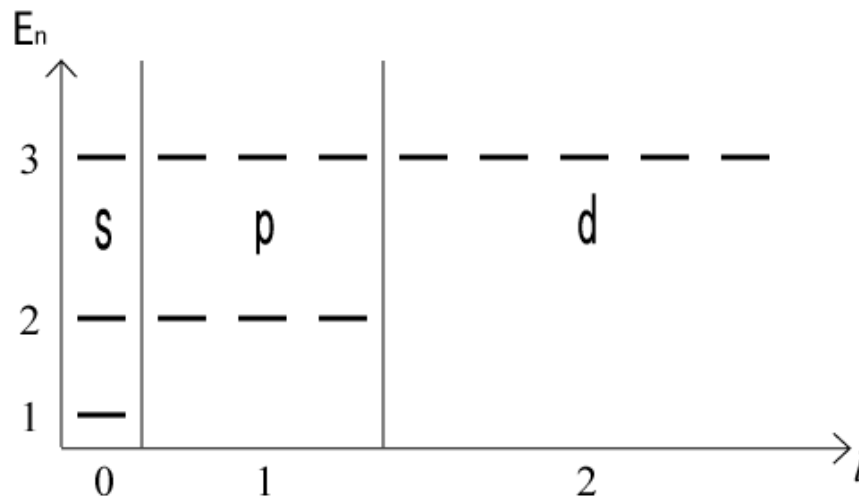
2-5 水素原子の電子のエネルギー準位の縮退

水素原子の電子のエネルギーは 主量子数 n にのみ依存し

$$E_n = -\frac{me^4}{8\varepsilon_0^2 h^2 n^2} = -\frac{e^2}{8\pi\varepsilon_0 a_0 n^2}$$

主量子数 n に対して $\sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = n^2$ の状態が存在する

これらのエネルギーが全て等しいとき、 n^2 重に縮退しているという



n	l	m
1	0	0
2	0	0
2	1	(-1,0,1)
3	0	0
3	1	(-1,0,1)
3	2	(-2,-1,0,1,2)

MEMO