水素原子の波動関数導出

- 式(1)を$P(r)=rR(r)$、$V(r)=-e^2/(4\pi\varepsilon_0 r)$関係式を用いて変形する.

$$-\frac{d^2}{dr^2}P(r)+\frac{l(l+1)}{r^2}P(r)-\frac{2}{r}P(r)=EP(r)$$

ただし, 次の関係を導入した原子単位系 (Ry)で表示されている. Eは$-1/n^2$である

$$\hbar/2m\rightarrow 1, e^2\rightarrow 2, 4\pi\varepsilon_0\rightarrow 1$$

この式を動径シュレディンガー方程式と呼ぶこともある.

各量子数の説明

主量子数, n、軌道量子数, l、磁気量子数, m_lの関係

n=1, 2, 3, ・・・
l=0, 1, 2, ・・・,(n-1)
m_l=0, ±1, ±2, ・・・, ±l

量子数の意味を考える

主量子数：*n*

$$E_n = -\frac{me^4}{32\pi^2\varepsilon_0^2\hbar^2}\left(\frac{1}{n^2}\right)$$

軌道量子数：*l*

磁気量子数： m_l

仮に水素の原子核を固定して上向きにz軸を取ったとする．

$$L_z = m_l\hbar$$

波動方程式を書き改めると，

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right)+\frac{2m}{\hbar^2}\left[K_{radial}+K_{orbital}-\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}\right]R=0$$

$$K_{orbital} = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} = \frac{L^2}{2mr^2}$$

$$n \geq l+1$$

$$m_l = 0, \pm 1, \cdots, \pm l$$

ただし，電子の角運動量をLとする．

$$L = \sqrt{l(l+1)}\hbar$$

水素原子の波動関数

$$\mathrm{Y}_{\ell m}(\theta,\phi)=\mathrm{N}_{\ell\mathrm{m}}\mathrm{P}_{\ell}^{m}(\cos\theta)\Phi_{m}(\phi)=\left[\frac{2\ell+1}{4\pi}\frac{(\ell-|m|)!}{(\ell+|m|)!}\right]^{1/2}\mathrm{P}_{\ell}^{\mathrm{m}}(\cos\theta)\exp(im\phi)$$

$$\mathrm{P}_{\ell}(\omega)=\frac{1}{2^{\ell}\,\ell!}\frac{d^{\ell}}{d\omega^{\ell}}\left(\omega^{2}-1\right)^{\ell}$$

$$\mathrm{R}_{n\ell}(r)=-\left\{\left(\frac{2}{n\mathrm{a}_{0}}\right)^{3}\frac{(n-\ell-1)!}{2n[(n+1)!]^{3}}\right\}^{1/2}\exp\left(-\frac{1}{2}\rho\right)\rho^{\ell}\,\mathrm{L}_{n+\ell}^{2\ell+1}(\rho)$$

$$\mathrm{L}_{n+\ell}^{2\ell+1}(\rho)=\sum_{k=0}^{n-\ell-1}(-1)^{k+1}\frac{[(n+1)!]^{2}\rho^{k}}{(n-\ell-1-k)!(2\ell+1+k)!k!}$$

$$\mathrm{a}_{0}=\frac{\hbar^{2}}{\mu e^{2}}\qquad\qquad \rho=\frac{2}{n\mathrm{a}_{0}}r$$

水素類似原子の波動関数（解析解）　$\chi_{nlm}=R_{nl}(\rho)Y_{lm}(\theta,\phi)$

動径関数

$$R_{nl}(\rho)=-\sqrt{\left(\frac{2Z}{na_H}\right)^3\frac{(n-l-1)!}{2n\{(n+l)!\}^3}}\left(\frac{2\rho}{n}\right)^l e^{-\rho/n}L_{n+l}^{2l+1}\left(\frac{2\rho}{n}\right)$$

a_H:ボーア半径, L_{n+l}^{2l+1}:ラゲール陪多項式，$\rho=Zr/a_H$

球面調和関数

$$Y_{lm}(\theta,\varphi)=\sqrt{\frac{(2l+1)(l-|m|)!}{4\pi(l+|m|)!}}P_l^{|m|}(\cos\theta)e^{im\varphi}$$

$P_l^{|m|}$:ルジャンドル陪多項式