

# 3-2 水素原子の波動関数

22

- 水素型原子 : 電子が原子核 (電荷  $Z$ ) に束縛されている

ポテンシャル:

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{r}$$

(水素原子 ( $Z=1$ ))

- Schrödinger 方程式:

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} - \frac{Ze^2}{r} \right] R_{nl}(r) = E_n R_{nl}(r)$$

$$\psi_{nlm}(r) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi)$$

$$\begin{cases} n = 1, 2, 3, \dots, \infty & (\text{主量子数}) \\ l = 0, 1, 2, \dots & (\text{角運動量}) \\ m_l = -l, -l+1, \dots, l-1, l & (\text{磁気量子数}) \end{cases}$$

エネルギー固有値  $E_n$

$$E_n = -\frac{m(Ze^2)^2}{2\hbar^2 n^2}$$

- $n=1$  ; 基底状態

$$\begin{aligned} \text{水素原子} \Rightarrow E_1 &= -\frac{me^4}{2\hbar^2} = -\frac{1}{2}mc^2 \cdot \left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)^2 \\ (z=1) &= -\frac{1}{2} \cdot 0.511 \cdot \left(\frac{1}{137.036}\right)^2 \\ E_1 &= \underline{13.6 \text{ [eV]}} \end{aligned}$$

- 角運動量  $\hat{L}^2, \hat{L}_z$  と  $Y_{lm}(\theta, \varphi)$

$$\begin{cases} \hat{L}^2 Y_{lm}(\theta, \varphi) = \hbar^2 l(l+1) Y_{lm}(\theta, \varphi) \\ \hat{L}_z Y_{lm}(\theta, \varphi) = \hbar m_l Y_{lm}(\theta, \varphi) \end{cases}$$

# [[ Z e o v e は何か? ]]

- 電子の Z e o v e :  $S = \frac{1}{2}$

Z e o v e は  $\rightarrow$  自由度



Dirac 方程式 の初めを 理解 する

- Z e o v e を 考慮 した 波動関数

$$\psi_{n l m_l m_s}(r) = R_{n l}(r) Y_{l m_l}(\theta, \phi) \chi_{m_s}$$

(spin wave function)

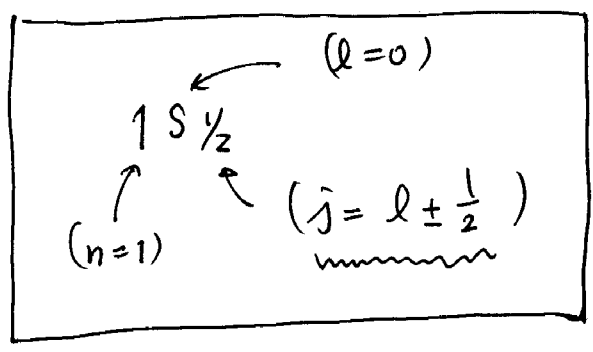
$$\left\{ \begin{array}{l} \chi_{\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \\ \chi_{-\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \end{array} \right.$$

Z e o v e 上  $\rightarrow$  上

Z e o v e 下  $\rightarrow$  下 12 対称

これは  $\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$  の固有関数

- 表記 :



- s : l=0
- p : l=1
- d : l=2
- ...

• 基底狀態：  
 $1s_{1/2}$  為最低之狀態  
↓  
穩定

• 勵起狀態：  
 $2p_{1/2}, 2p_{3/2}, 2s_{1/2}, \dots$   
↓  
電磁波之放出，最終的為  
光子  $1s_{1/2}$  狀態之光子

- 電磁波：
- 1. 光 (可視光) :
    - $\lambda \approx 8 \times 10^5 \text{ cm}$  (赤)
    - $E \approx 0.25 \text{ eV}$
    - $\lambda \approx 5 \times 10^5 \text{ cm}$  (青)
    - $E \approx 0.4 \text{ eV}$
  - 2. X 線 :
    - $\lambda \approx (10^{-6} \sim 10^{-8}) \text{ cm}$
    - $E \approx (20 \text{ eV} \sim 2 \text{ k eV})$
  - 3.  $\gamma$  線 :
    - $\lambda \leq 10^{-8} \text{ cm}$
    - $E \geq 2 \text{ keV}$
  - 4. 電波 :
    - $\sim 10^2 \text{ cm}$  UHF
    - $\sim 10^6 \text{ cm}$  長波