

8-2-4 水素原子の波動関数

電子の波動関数

① Schrödinger 方程式は

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\hat{L}^2}{2mr^2} - \frac{Ze^2}{r} \right] \psi(r) = E \psi(r)$$

$\hat{L}^2$ の固有関数は $Y_{lm}(\theta, \phi)$

$$\hat{L}^2 Y_{lm}(\theta, \phi) = \hbar^2 l(l+1) Y_{lm}(\theta, \phi)$$

$$\hat{L}_z Y_{lm}(\theta, \phi) = \hbar m Y_{lm}(\theta, \phi)$$

したがって $\psi(r) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \phi)$ と可分する。

Schrödinger 方程式は

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

したがって $R_{nl}(r)$ の n は量子数
(軌道部分の量子数)

• 境界条件 :

$$\begin{cases} R_{nl}(0) = \text{有限} \\ R_{nl}(\infty) = 0 \end{cases}$$

• 変数変換

$$\begin{cases} \psi(r) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \phi) \\ R_{nl}(r) = \frac{1}{r} u(r) \end{cases}$$

$$\begin{cases} \rho = 2 \sqrt{\frac{2m|E|}{\hbar^2}} r \\ E = \sqrt{\frac{m e^4}{2 \hbar^2 |E|}} \end{cases} \quad \text{とある.}$$

注 : E は 束縛状態 である (と 負)

$$\boxed{E < 0} \quad E = -|E|$$

この時 Schrodinger 方程式は

$$\boxed{\frac{d^2 u(\rho)}{d \rho^2} + \left[-\frac{1}{4} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} + \frac{\rho Z}{\rho} \right] u(\rho) = 0}$$

とある.

そこで

$$\boxed{u(\rho) = e^{-\frac{\rho}{2}} \rho^{l+1} L(\rho)}$$

と $L(\rho)$ の微分方程式と求める.

α, 2 微分方程式は

$$\rho L''(\rho) + [2(\ell+1) - \rho] L'(\rho) + (\epsilon Z - \ell - 1) L(\rho) = 0$$

とある。

この方程式は 級数展開で解く

$$L(\rho) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \rho^n$$

これを方程式に代入。 ρ の恒等式が成り立つ

ρ^n の係数は 0 に等しく α, 2

$$(\epsilon Z - \ell - 1 - n) a_n + [2(n+1)(\ell+1) + n(n+1)] a_{n+1} = 0$$

境界条件は $\rho \rightarrow \infty$ $u(\infty) = 0$

ρ が大きくなると $\Rightarrow$ n が大きくなる

$$\underline{n \gg 1} \Rightarrow \boxed{\frac{a_n}{a_{n+1}} \sim n}$$

d, z

$$a_n \approx \frac{1}{n!}$$

正しい.

§8.1

$$L(p) \sim \sum \frac{1}{n!} p^n \sim e^p \quad \text{正しい.}$$

この時 $u(p)$ は

$$u(p) \sim e^{-\frac{p}{2}} p^{l+1} e^p \approx e^{\frac{p}{2}} p^{l+1} \quad \text{正しい}$$

$$p \rightarrow \infty \quad \text{で} \quad u(\infty) \rightarrow \infty \quad \text{正しい.}$$

これは境界条件 $u(\infty) = 0$ と矛盾する!!



$$(\ell - l - 1 - n) a_n + [2(n+1)(l+1) + n(n+1)] a_{n+1} = 0$$

したがって

$$\ell - l - 1 - n = 0$$

したがって ある n から始まる $a_n = 0$ と (これを n_0 とする)

$$a_{n_0+1} = 0 \quad \text{より} \quad \text{これから先の } a_n \text{ はゼロ.}$$

$z \rightarrow \infty$ $P \rightarrow \infty$ $z \rightarrow 0$ $U(r) \rightarrow 0$ $z \rightarrow 0$ $z \rightarrow 0$ $z \rightarrow 0$

$$u(p) \sim e^{-\frac{p}{2}} p^{l+1} \cdot p^{n_0}$$

243.

$$\xi \in \mathbb{R}^1 \quad \rho \rightarrow \infty \quad \text{u}(\infty) \rightarrow 0 \quad \text{e 2f y}$$

1952年5月