9-2-5　エネルギー固有値と波動関数

$$\boxed{\epsilon Z - l - 1 - n_0 = 0}$$

ここで　$\underline{n \equiv n_0 + l + 1}$　とおく。

$$\epsilon = \sqrt{\frac{me^4}{2\hbar^2|E|}}$$ より

$$\epsilon Z - n = 0$$

$$\therefore \boxed{E = -\frac{mZ^2e^4}{2\hbar^2 n^2}}$$ となる。

但し $\begin{cases} n_0 = 0, 1, 2, \cdots \\ l = 0, 1, 2, \cdots \end{cases}$

これより

$$\boxed{n = 1, 2, 3, \cdots}$$

$n_0 = n - l - 1 \geqq 0$ より

$$\boxed{l \leqq n - 1}$$

$$\begin{cases} n=1 & l=0 \\ n=2 & l=0,1 \\ n=3 & l=0,1,2 \\ \vdots & \vdots \end{cases}$$

【基底状態】

最低エネルギー状態 ： $\boxed{n=1}$

⇓

この時 $\boxed{l=0}$

$\boxed{1S}$ 状態という

- 水素原子のエネルギー $(Z=1)$

$$E_{1s} = -\frac{me^4}{2\hbar^2} = -\frac{1}{2}(mc^2)\cdot\left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)^2$$

（ここで $\alpha \equiv \frac{e^2}{\hbar c} = \frac{1}{137}$ を微細構造定数という）

電子の質量 ： $m = 0.51\ \mathrm{MeV}/c^2$ より

$$E_{1s} = -\frac{1}{2}\ 0.51\ (\mathrm{MeV})\left(\frac{1}{137}\right)^2 = -13.6\ \mathrm{eV}$$

↓（水素原子の基底状態の電子をひっぺ返して、自由電子状態にするのに必要なエネルギー）

$\boxed{\text{イオン化エネルギー}}$ という

［基底状態の波動関数］

1S 状態 ： $n=1,\ l=0,\ m=0$

$$\psi_{1s}(r) = R_{1s}(r)\frac{1}{\sqrt{4\pi}} \qquad \left(Y_{00} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}\right)$$

↓

$$R_{1s}(r) = \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} 2\, e^{-\frac{Z}{a_0}r}$$

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2} = 0.53\times 10^{-8}\ \mathrm{cm}$$

（a_0 ： Bohr 半径という）

(a) 規格化 ：

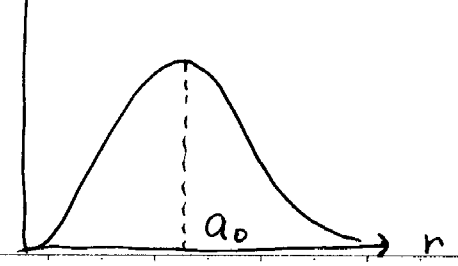
$$\int |\psi_{1s}(r)|^2 d^3r$$

$$= \frac{1}{4\pi}\int |R_{1s}(r)|^2\, 4\pi r^2 dr$$

$$= \left(\frac{Z}{a_0}\right)^3 \cdot 4 \cdot \int_0^\infty e^{-\frac{2Z}{a_0}r}\, r^2 dr = 1$$

(b) 確率密度：

$$\rho(r) = |R_{1s}(r)|^2 r^2$$



［励起状態の波動関数］

第1励起状態

$$\boxed{n=2} \quad \begin{cases} 2S\text{-状態} & (n=2,\ l=0) \\ 2p\text{-状態} & (n=2,\ l=1) \end{cases}$$

(a) 2S-状態：

$$\begin{cases} R_{2s}(r) = \dfrac{1}{2\sqrt{2}}\left(\dfrac{Z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}}\left(2-\dfrac{Zr}{a_0}\right) e^{-\frac{Z}{2a_0}r} \\ Y_{00} = \dfrac{1}{\sqrt{4\pi}} \end{cases}$$

(b) 2p-状態：

$$R_{2p}(r) = \left(\frac{Z}{2a_0}\right)^{\frac{3}{2}}\left(\frac{Zr}{\sqrt{3}\,a_0}\right) e^{-\frac{Z}{2a_0}r}$$

$$\begin{cases} Y_{1,1}(\theta,\varphi) = -\sqrt{\dfrac{3}{8\pi}}\,\sin\theta\, e^{i\varphi} \\ Y_{1,0}(\theta,\varphi) = \sqrt{\dfrac{3}{4\pi}}\,\cos\theta \\ Y_{1,-1}(\theta,\varphi) = \sqrt{\dfrac{3}{8\pi}}\,\sin\theta\, e^{-i\varphi} \end{cases}$$

【水素原子の安定性】

量子力学：最低エネルギー状態の存在

↓

基底状態は安定

（これ以上低い状態がないので）

【問題】：電子が陽子に吸収されることはないのか？

[反応]　$e^- + p \rightarrow n + \nu$

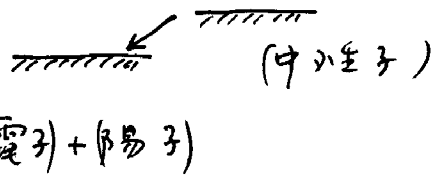
(電子)　(陽子)　(中性子)　(ニュートリノ)

[禁止]　この反応自体は可能

しかし　エネルギー的に

$\boxed{\text{不可能}}$

[理由]　陽子より中性子の方が質量が重い!!



中性子は崩壊する

[スピンについて]

水素原子の 1S 状態

⇓

[2つの状態がある]

⇕

電子はスピンをもっている

$$\boxed{1S \Rightarrow 1S_{1/2}}$$

この $\frac{1}{2}$ は $j = l + s$

の $\boxed{j}$ のこと

$n=1$ $1S_{1/2}$

$n=2$ $\left\{ \begin{array}{lll} 2S_{1/2} & j=\frac{1}{2} & l=0 \\ 2P_{1/2} & j=\frac{1}{2} & l=1 \\ 2P_{3/2} & j=\frac{3}{2} & l=1 \end{array} \right.$

↓ **Dirac 方程式** がよい記述をしている

スピン・軌道

$2P_{3/2}$

$2P_{1/2}, 2S_{1/2}$ ⇒ (Lamb シフト)

→ くりこみ理論

$1S_{1/2}$