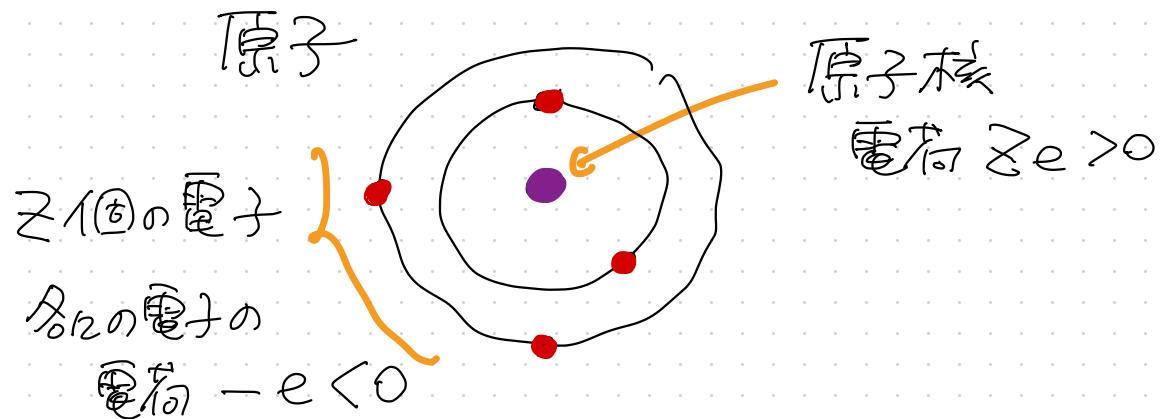


〈水素原子のエネルギー固有状態〉 /



電子のところエネルギーは「とびとび」
量子力学の出発点のひとつ

$Z=1$ の水素原子を詳しく説くよ！

$\bullet -e$ $\bullet +e$ \uparrow
 原子核 = 陽子 は原点 $(0, 0, 0)$ に静止
 電子の質量を μ

電子の感じたクーロンポテンシャル (古典)

$$V(H) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{|H|} \quad (1)$$

氷素原子の Schrödinger 方程式'

大胆な仮定!

電子の Schrödinger 方程式'

原子の中でもクーロンポテンシャルが使ふとします。

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{|\mathbf{r}|} \right\} \psi(\mathbf{r}) = E \psi(\mathbf{r}) \quad (1)$$

二の解を求めるのが目標。

ハミルトニアンと角運動量演算子

(1) を $\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle$ (2) と書く

$$\hat{H} = \sum_{\alpha} \hat{p}_{\alpha}^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{|\mathbf{r}|} \quad (3)$$

$\sqrt{\hat{p}^2}$ (かけ算演算子)

$$[\hat{L}_{\alpha}, \hat{p}^2] = 0, [\hat{L}_{\alpha}, \hat{p}^2] = 0 \quad (\alpha = x, y, z) \text{ たり}$$

$$[\hat{H}, \hat{p}^2] = 0, [\hat{H}, \hat{L}_z] = 0, [\hat{p}^2, \hat{L}_z] = 0 \quad (4)$$

$\hat{H}, \hat{p}^2, \hat{L}_z$ の同時に状態を求める

E, l, m が確定した状態

ラフラシアンと角運動量

$|H|^2$ の二乗
(Hも同様)

$$\text{古典力学} \quad |H \times P|^2 + |H \cdot P|^2 = H^2 P^2 \quad (1)$$

$$\Rightarrow H^2 P^2 = \left| \frac{H}{|H|} \cdot P \right|^2 + \frac{H^2}{H^2} \quad (2)$$

P_r 重力径方向の運動量

△量子力学でモーメンタの関係は有りか?

$$-h^2 \Delta \quad \hat{P}^2 \stackrel{?}{=} (P_r)^2 + \frac{\hat{L}^2}{\hbar^2} \quad (3)$$

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \quad (4) \quad \left. \right\} \text{IC1-243.}$$

$$-\frac{1}{\hbar^2} \hat{L}^2 = -\frac{1}{\hbar^2} ((\hat{L}_x)^2 + (\hat{L}_y)^2 + (\hat{L}_z)^2) \quad (5)$$

$$\begin{aligned} -\frac{1}{\hbar^2} (\hat{L}_x)^2 &= \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) \\ &= y^2 \frac{\partial^2}{\partial z^2} + z^2 \frac{\partial^2}{\partial y^2} - y \frac{\partial}{\partial y} - z \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial^2}{\partial y \partial z} - z \frac{\partial^2}{\partial z^2} - z y \frac{\partial^2}{\partial y \partial z} \end{aligned}$$

$$= y^2 \frac{\partial^2}{\partial z^2} + z^2 \frac{\partial^2}{\partial y^2} - y \frac{\partial^2}{\partial y^2} - z \frac{\partial^2}{\partial z^2} - 2yz \frac{\partial^2}{\partial y \partial z} \quad (6)$$

4

対称性に注意すれば

$$-\frac{1}{h^2} (\hat{L}_x)^2 = \boxed{y^2 \frac{\partial^2}{\partial z^2} + z^2 \frac{\partial^2}{\partial y^2}} - y \frac{\partial}{\partial y} - z \frac{\partial}{\partial z} - 2yz \frac{\partial^2}{\partial y \partial z} \quad (1)$$

$$-\frac{1}{h^2} (\hat{L}_y)^2 = \boxed{z^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} + x^2 \frac{\partial^2}{\partial z^2}} - z \frac{\partial}{\partial z} - x \frac{\partial}{\partial x} - 2zx \frac{\partial^2}{\partial z \partial x} \quad (2)$$

$$-\frac{1}{h^2} (\hat{L}_z)^2 = \boxed{x^2 \frac{\partial^2}{\partial y^2} + y^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2}} - x \frac{\partial}{\partial x} - y \frac{\partial}{\partial y} - 2xy \frac{\partial^2}{\partial x \partial y} \quad (3)$$

よって

$$-\frac{1}{h^2} \hat{L}^2 = (x^2 + y^2 + z^2) \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right)$$

(A)

$$-x^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} - y^2 \frac{\partial^2}{\partial y^2} - z^2 \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

(B)

$$-2xz \frac{\partial}{\partial x} - 2yz \frac{\partial}{\partial y} - 2zx \frac{\partial}{\partial z}$$

(C)

$$-2yz \frac{\partial^2}{\partial y \partial z} - 2zx \frac{\partial^2}{\partial z \partial x} - 2xy \frac{\partial^2}{\partial x \partial y}$$

$$= r^2 \Delta - \left(x \frac{\partial}{\partial x} + y \frac{\partial}{\partial y} + z \frac{\partial}{\partial z} \right)^2$$

$$- \left(x \frac{\partial}{\partial x} + y \frac{\partial}{\partial y} + z \frac{\partial}{\partial z} \right)$$

$$= r^2 \Delta - (h \cdot \nabla)^2 - h \cdot \nabla$$

(4)

$$\text{左} \times \text{右} \Rightarrow \left(x \frac{\partial}{\partial x} \right)^2 = x^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} + x \frac{\partial}{\partial x}$$

$$\nabla = \left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z} \right)$$

$$-\frac{1}{\hbar^2} \hat{\mathbb{L}}^2 = r^2 \Delta - (\mathbf{k} \cdot \nabla)^2 - \mathbf{k} \cdot \nabla \quad (1)$$

$$\text{極座標を用いて } \mathbf{k} \cdot \nabla = r \frac{\partial}{\partial r} \quad (2)$$

$$\begin{aligned} \therefore r \frac{\partial}{\partial r} \Psi(r \sin \theta \cos \varphi, r \sin \theta \sin \varphi, r \cos \theta) \\ &= r \sin \theta \cos \varphi \frac{\partial \Psi}{\partial x} + r \sin \theta \sin \varphi \frac{\partial \Psi}{\partial y} + r \cos \theta \frac{\partial \Psi}{\partial z} \\ &= x \frac{\partial \Psi}{\partial x} + y \frac{\partial \Psi}{\partial y} + z \frac{\partial \Psi}{\partial z} \end{aligned} \quad (3)$$

$$\begin{aligned} -\frac{1}{\hbar^2} \hat{\mathbb{L}}^2 &= r^2 \Delta - \left(r \frac{\partial}{\partial r} \right)^2 - r \frac{\partial^2}{\partial r^2} \\ &= r^2 \Delta - r^2 \frac{\partial^2}{\partial r^2} - 2r \frac{\partial}{\partial r} \\ &= r^2 \left\{ \Delta - \frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right\} \end{aligned} \quad (4)$$

$$[\hat{\mathbb{L}}^2, \hat{H}^2] = 0 \text{ でない}^2$$

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{\hbar^2} \frac{\hat{\mathbb{L}}^2}{r^2} \quad (5)$$

$-\hbar^2 e \delta V T^3 C$

$$\hat{\mathbb{P}}^2 = -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{2\hbar^2}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\hat{\mathbb{L}}^2}{r^2} \quad (6)$$

P3-(3) は $\frac{1}{2}$
 $\frac{\hbar^2}{r^2} \delta V T^3 C$

多極座標での Schrödinger 方程式

P2-(1) は PS-(5) を A⁻¹ とすると
 $r = |\mathbf{r}|$ となる

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{2\mu} \frac{\mathbb{L}^2}{r^2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right\} \Psi(r) = E \Psi(r) \quad (1)$$

E, l, m が確定した 同時固有状態をさがすの?

$$\Psi(x, y, z) = R(r) Y_l^m(\theta, \varphi) \quad (2)$$

$$\int_0^\infty dr r^2 |R(r)|^2 = 1 \quad (3)$$

$$\mathbb{L}^2 Y_l^m(\theta, \varphi) = l(l+1) \hbar^2 Y_l^m(\theta, \varphi) \quad (4)$$

(2) と (1) は A⁻¹

$$\begin{aligned} & -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) R(r) Y_l^m(\theta, \varphi) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} R(r) Y_l^m(\theta, \varphi) \\ & - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} R(r) Y_l^m(\theta, \varphi) = E R(r) Y_l^m(\theta, \varphi) \end{aligned} \quad (5)$$

$Y_l^m(\theta, \varphi)$ は 定数

$$\begin{aligned} & -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) R(r) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} R(r) - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} R(r) \\ & = E R(r) \end{aligned} \quad (6)$$

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) \frac{1}{r} = 0 \quad (r \neq 0 \text{ のとき}) \quad \text{左側出力} \quad (1)$$

$$R(r) = \frac{\chi(r)}{r} \quad (2)$$

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) R(r) = \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) \frac{\chi(r)}{r} = \frac{1}{r} \frac{\partial^2 \chi(r)}{\partial r^2} \quad (3)$$

$$\begin{aligned} \because \left(\frac{\chi}{r} \right)'' &= \left(\frac{\chi'}{r} - \frac{\chi}{r^2} \right)' = \frac{\chi''}{r} - \frac{\chi'}{r^2} - \frac{\chi'}{r^2} + 2 \frac{\chi}{r^3} \quad (4) \\ \frac{2}{r} \left(\frac{\chi}{r} \right)' &= \frac{2}{r} \left(\frac{\chi'}{r} - \frac{\chi}{r^2} \right) = \frac{2\chi'}{r^2} - \frac{2\chi}{r^3} \quad (5) \end{aligned}$$

P6-(6)

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) R(r) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} R(r) - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \frac{1}{r} R(r) = E R(r) \quad (6)$$

\downarrow \downarrow \downarrow \downarrow
 $\frac{1}{r} \frac{\partial^2 \chi(r)}{\partial r^2}$ $\frac{1}{r} \chi(r)$ $\frac{1}{r} \chi(r)$ $\frac{1}{r} \chi(r)$

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2 \chi(r)}{\partial r^2} + \left(\frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) \chi(r) = E \chi(r) \quad (7)$$

 $r \geq 0$

動径方向の Schrödinger 方程式

▶ 動径方向の Schrödinger 方程式

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2 \chi(r)}{\partial r^2} + \left(\frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) \chi(r) = E \chi(r) \quad (1)$$

$r \geq 0$

$$V_{\text{eff}}(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} \quad (2)$$

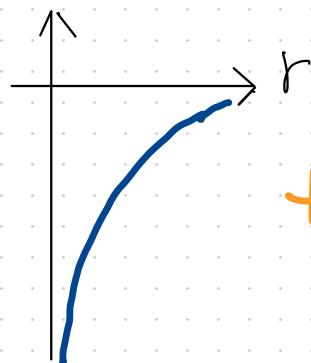
クーロンポテンシャル

遠心力のポテンシャル

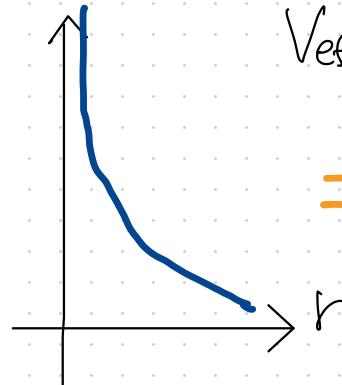
effective (実効的)

ポテンシャル $V_{\text{eff}}(r)$ のある 1 次元 (ただし $r \geq 0$ の半無限空間) での Schrödinger 方程式

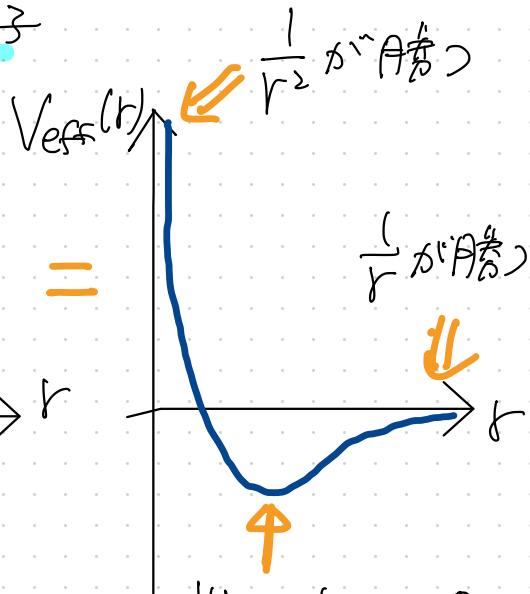
▶ (1) のときの $V_{\text{eff}}(r)$ の様子



$$-\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r}$$

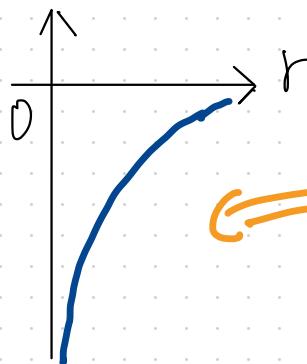


$$\frac{l(l+1)}{2\mu} \frac{1}{r^2}$$



量子力学でこのあたりにいたる。

▷ $Q=0$ のときの $V_{\text{eff}}(r)$ の様子



$$V_{\text{eff}}(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} \quad (1)$$

未だでは $r \rightarrow 0$ に
おちこむよ？
↓

ちゃんと解いてみないとわからぬ。

▷ $X(r)$ につける境界条件

$$X(r) = r R(r) \quad (2) \quad \text{Euler の式}$$

$$\left. \begin{array}{l} X(0) = 0 \\ \int_0^\infty dr |X(r)|^2 = 1 \end{array} \right\} \quad (3)$$

$$\int_0^\infty dr |X(r)|^2 = 1 \quad (4)$$

$$\text{よし } r \rightarrow \infty \text{ で } X(r) \rightarrow 0 \quad (5)$$

p6-(3)

10

方程式を一次元化する

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2 \tilde{\chi}(r)}{dr^2} + \left(\frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) \tilde{\chi}(r) = E \tilde{\chi}(r) \quad (1)$$

$$r = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{\mu e^2} p \quad (2) \quad \tilde{\chi}(p) = \tilde{\chi}(ap) = \tilde{\chi}(r) \quad (3)$$

$a = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{\mu e^2}$ \Rightarrow Bohr 半径!

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \left(\frac{\mu e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar^2} \right)^2 \frac{d^2 \tilde{\chi}(p)}{dp^2} + \left\{ \left(\frac{\mu e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar^2} \right)^2 \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{p^2} - \frac{\mu e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar^2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 p} \right\} \tilde{\chi}(p) = E \tilde{\chi}(p) \quad (4)$$

$$\frac{\mu e^4}{2(4\pi\epsilon_0 \hbar^2)^2} \left\{ -\tilde{\chi}''(p) + \left(\frac{l(l+1)}{p^2} - \frac{2}{p} \right) \tilde{\chi}(p) \right\} = E \tilde{\chi}(p) \quad (5)$$

$$E = -\frac{2(4\pi\epsilon_0 \hbar^2)^2}{\mu e^4} E = -\frac{2\mu a^2}{\hbar^2} E \quad (6)$$

$\times 10^{-17} \text{ eV}$

$$\tilde{\chi}''(p) + \left(-\frac{l(l+1)}{p^2} + \frac{2}{p} - E \right) \tilde{\chi}(p) = 0 \quad (7)$$

△ ここでこのまとめ

11

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{|\mathbf{r}|} \right\} \Psi(\mathbf{r}) = E \Psi(\mathbf{r}) \quad (1)$$

$$\Psi(x, y, z) = R(r) Y_l^m(\theta, \phi) \quad (2)$$

$$R(r) = \frac{\chi(r)}{r} \quad (3)$$

a を半径の $2\pi \rightarrow$ Bohr 半径!

$$r = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{\mu e^2} p \quad (4)$$

$$\tilde{\chi}(p) = \chi(ap) = \chi(r) \quad (5)$$

$l = 0, 1, 2, \dots$

$$\tilde{\chi}''(p) + \left(-\frac{l(l+1)}{p^2} + \frac{2}{p} - \epsilon \right) \tilde{\chi}(p) = 0 \quad (6)$$

$p \geq 0$

$\tilde{\chi}(p) \propto e^{-\epsilon p/2}$ で決める。

$$\bullet \text{ただし } \tilde{\chi}(0) = 0 \quad (7)$$

$$\bullet p \nearrow \infty \text{ で } \tilde{\chi}(p) \rightarrow 0 \quad (8)$$

この ϵ を 1, 2 で決めて 固有値 E は

$$E = -\frac{\hbar^2}{2\mu a^2} \epsilon \quad (9)$$

と書ける。

水素原子のエネルギー回転と回転運動 12

E の範囲

$$\tilde{\chi}''(p) + \left(-\frac{l(l+1)}{p^2} + \frac{2}{p} - E \right) \tilde{\chi}(p) = 0 \quad (1)$$

$$p \gg l \text{ では } \tilde{\chi}''(p) \simeq E \tilde{\chi}(p) \quad (2)$$

E < 0 なら

$$\tilde{\chi}(p) \simeq C e^{i\sqrt{|E|}p} + C' e^{-i\sqrt{|E|}p} \quad (3)$$

E = 0 なら

$$\tilde{\chi}(p) \simeq C + C' p \quad (4)$$

$p \rightarrow \infty$ で
 $\tilde{\chi}(p) \rightarrow 0$ となる

E > 0 なら

$$\tilde{\chi}(p) \simeq C e^{\sqrt{E}p} + C' e^{-\sqrt{E}p} \quad (5)$$

OK!!

つまり E > 0

E < 0 古典力学



さういふ方程式をかぎる。

$$\tilde{X}(P) = \underline{f(P)} e^{-\sqrt{\epsilon}P} \quad (1) \quad \text{とおく}$$

新しい未知数

$$\tilde{X}' = f' e^{-\sqrt{\epsilon}P} - \sqrt{\epsilon} f e^{-\sqrt{\epsilon}P} \quad (2)$$

$$\tilde{X}'' = f'' e^{-\sqrt{\epsilon}P} - 2\sqrt{\epsilon} f' e^{-\sqrt{\epsilon}P} + \epsilon f e^{-\sqrt{\epsilon}P} \quad (3)$$

左

$$\tilde{X}'' + \left(-\frac{l(l+1)}{P^2} + \frac{2}{P} - \epsilon \right) \tilde{X} = 0 \quad (4)$$

(= 代入)

$$f'' e^{-\sqrt{\epsilon}P} - 2\sqrt{\epsilon} f' e^{-\sqrt{\epsilon}P} + \cancel{\epsilon f e^{-\sqrt{\epsilon}P}} + \left(-\frac{l(l+1)}{P^2} + \frac{2}{P} - \epsilon \right) f e^{-\sqrt{\epsilon}P} = 0 \quad (5)$$

$$f''(P) - 2\sqrt{\epsilon} f'(P) + \left(-\frac{l(l+1)}{P^2} + \frac{2}{P} \right) f(P) = 0 \quad (6)$$

整理 (2) .

$$\left\{ f''(P) - l(l+1) \frac{f(P)}{P^2} \right\} + 2 \left\{ \frac{f(P)}{P} - \sqrt{\epsilon} f'(P) \right\} = 0 \quad (7)$$

二つを角等しく！

14

△ 単項式の解

$$\left\{ f''(p) - l(l+1) \frac{f(p)}{p^2} \right\} + 2 \left\{ \frac{f(p)}{p} - \sqrt{\epsilon} f'(p) \right\} = 0 \quad (1)$$

$$f(p) = p^s \quad \text{を代入} \quad (s \text{は二ねんをなす定数}) \quad (2)$$

$$\left\{ s(s-1) - l(l+1) p^{s-2} + 2(1 - \sqrt{\epsilon} s) p^{s-1} \right\} = 0 \quad (3)$$
$$(3a) \quad s(s-1) - l(l+1) = 0 \quad (4)$$

$$(3b) \quad 1 - \sqrt{\epsilon} s = 0 \quad (5)$$

$$s^2 - s - l(l+1) = 0 \rightarrow (s+l)(s-l+1) = 0 \quad (6)$$

$$\therefore s = -l, l+1$$

$$\bullet s = -l \quad \tilde{x}(p) = p^{-l} e^{-\sqrt{\epsilon} p} \quad (6)$$

$p \rightarrow 0$ で $\tilde{x}(p) \rightarrow 0$ はいい感じ！ $\tilde{x}'(0)$ も

$$\bullet s = l+1 \quad \tilde{x}(p) = p^{l+1} e^{-\sqrt{\epsilon} p} \quad (7)$$

$$\tilde{x}'(0) = 0 \quad \text{OK!}$$

$$(3b) \text{ より } \epsilon = \frac{1}{(l+1)^2} \quad (8) \quad \text{ で } l=0, 1, 2, \dots$$

$$\begin{cases} f(p) = C_1 p^{l+1} & (9) \\ \epsilon = \frac{1}{(l+1)^2} & (10) \end{cases}$$

は (1) の解

多項式の解

$$\left\{ f''(P) - l(l+1) \frac{f(P)}{P^2} \right\} + 2 \left\{ \frac{f(P)}{P} - \sqrt{\epsilon} f'(P) \right\} = 0 \quad (1)$$

(A)

(B)

$$f(P) = C_1 P^{l+1} + C_2 P^{l+2} \quad \text{E/E}\lambda \quad (2)$$

(a)

(b)

(A)-a

(B)-a

$$C_1 \{(l+1)l - l(l+1)\} P^{l-1} + 2C_1 \{1 - (l+1)\sqrt{\epsilon}\} P^l$$

" "

$$0 + C_2 \{(l+2)(l+1) - l(l+1)\} P^l + 2C_2 \{1 - (l+2)\sqrt{\epsilon}\} P^{l+1} = 0 \quad (3)$$

(A)-b

(B)-b)

ϵ をきめたあと、 C_1, C_2 を
うまくえらべば 口にいきます！

$$\epsilon = \frac{l}{(l+2)^2}$$

(4)

16

$$\left\{ f''(p) - l(l+1) \frac{f(p)}{p^2} \right\}_p + 2 \left\{ \frac{f(p)}{p} - \sqrt{\epsilon} f'(p) \right\} = 0 \quad (1)$$

-般に $\nu = 1, 2, \dots$ で $\nu \geq 1/2$

$$f(p) = C_1 p^{l+1} + C_2 p^{l+2} + \dots + C_\nu p^{l+\nu} \quad (2)$$

$$\begin{aligned}
 & C_1 \cancel{(l+1)l - l(l+1)} p^{l-1} + 2C_1 \cancel{(1-(l+1))} \sqrt{\epsilon} p^l \\
 & \parallel \\
 & + C_2 \cancel{(l+2)(l+1) - l(l+1)} p^l + 2C_2 \cancel{(1-(l+2))} \sqrt{\epsilon} p^{l+1} \\
 & \vdots \quad \vdots \\
 & C_\nu \cancel{(l+\nu)(l+\nu-1) - l(l+1)} p^{l+\nu-2} + 2C_\nu \cancel{(1-(l+\nu))} \sqrt{\epsilon} p^{l+\nu-1} = 0 \quad (3)
 \end{aligned}$$

$C_\nu, C_{\nu-1}, \dots, C_1$ を用いて ϵ の値を求める

$$\epsilon = \frac{1}{(l+\nu)^2} \quad (4)$$

これが入射の解は正しいのか?

無限級数の解

$$\left[f''(p) - l(l+1) \frac{f(p)}{p^2} \right] + 2 \left\{ \frac{f(p)}{p} - \sqrt{\epsilon} f'(p) \right\} = 0 \quad (1)$$

(A)

(B)

$$f(p) = \sum_{\nu=1}^{\infty} C_{\nu} p^{\nu+l} \quad (2)$$

を (1) (= 代入)

$p^{\nu+l-2}$ の係数は?

$$C_{\nu} p^{\nu+l} \quad \textcircled{A}$$

$$C_{\nu-1} p^{\nu+l-1} \quad \textcircled{B}$$

$$\{(l+\nu)(l+\nu-1) - l(l+1)\} C_{\nu} + 2\{1 - \sqrt{\epsilon}(l+\nu-1)\} C_{\nu-1} = 0 \quad (3)$$

$\nu \gg l$ 时

$$\nu^2 C_{\nu} \approx 2\nu \sqrt{\epsilon} C_{\nu-1} \quad (4)$$

$$C_{\nu} \approx \frac{2\sqrt{\epsilon}}{\nu} C_{\nu-1} \quad (5) \quad C_{\nu} \approx \frac{(2\sqrt{\epsilon})^{\nu}}{\nu!} A \quad (6)$$

$$f(p) \sim \sum_{\nu=1}^{\infty} \frac{(2\sqrt{\epsilon})^{\nu}}{\nu!} p^{\nu} p^l A \approx A p^l e^{2\sqrt{\epsilon} p} \quad (?)$$

$$\therefore \tilde{X}(p) = f(p) e^{-\sqrt{\epsilon} p} \sim A p^l e^{\sqrt{\epsilon} p} \quad (8)$$

p12 もう解!

p16-(2), (4) の解がうまくいく!

四 エネルギー 固有値

$$P16-(4) E = \frac{1}{(R+V)^2} \quad (1)$$

$\int l=0, 1, 2, \dots$ 角運動量の大きさ
 $\int v=1, 2, \dots$

$$n = l + v \quad (2) \quad \text{と書く} \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (3)$$

P11-(9) より

$$E_n = -\frac{\hbar^2}{2\mu a^2} \quad (4) \quad \leftarrow \text{重複!}$$

$$\left(\text{半径 } a = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{\mu e^2} \right) \quad (5)$$

(2) より 各 n の n に 対応する l は \rightarrow 方位量子数

$$l = 0, 1, \dots, n-1 \quad (6)$$

$$\exists l \text{ の } l \text{ は } \text{対応} \quad m = -l, -l+1, \dots, l-1, l \quad (7)$$

$2l+1$ 通り

よって E_n の総数の次数

$$\sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = \frac{2(n-1)n}{2} + n = n^2 \quad (8)$$

エネルギー準位の名前

$n=1 \quad l=0_{\text{sigma}}$ 1S 状態 1重

$n=2 \quad l=\begin{cases} 0 \\ 1 \end{cases}$ 2S 状態 1重
2P 状態 3重 $\left.\right\{ 4\text{重}$

$n=3 \quad l=\begin{cases} 0 \\ 1 \\ 2 \end{cases}$ 3S 状態 1重
3P 状態 3重
3D 状態 5重 $\left.\right\{ 9\text{重}$

エネルギー-固有状態

各 n, l の解 $f_{n,l}(p)$ $\rightarrow \sqrt{E} = l/n$

$$\tilde{\chi}_{n,l}(p) = f_{n,l}(p) e^{-\sqrt{E}p} \quad (1)$$

$$R_{n,l}(r) = \frac{1}{r} \tilde{\chi}_{n,l}\left(\frac{r}{a}\right) \quad (2)$$

2) エルギー-固有状態

$$\Psi_{n,l,m}(x, y, z) = R_{n,l}(r) Y_l^m(\theta, \varphi) \quad (3)$$

規格化 $\int_0^\infty dr |R_{n,l}(r)|^2 r^2 = 1 \quad (4)$

$$P_{n,l}(r) = |R_{n,l}(r)|^2 r^2 \quad (5)$$

電子が「電子が $1s$ から $2s$ 」 r のところに $=113$ 確率密度。

21

$R_{n,l}(r)$ の具体形

$\lambda = 1$ のとき

$$l=n-1, \quad n=1, 2, 3, \dots$$

$$f_{n,n-1}(p) = C p^{l+1} \quad (1)$$

$$\sqrt{E} = \frac{1}{n}$$

$$\tilde{\chi}_{n,n-1}(p) = f_{n,n-1}(p) e^{-\sqrt{E}p} = C p^n e^{-\frac{p}{n}} \quad (2)$$

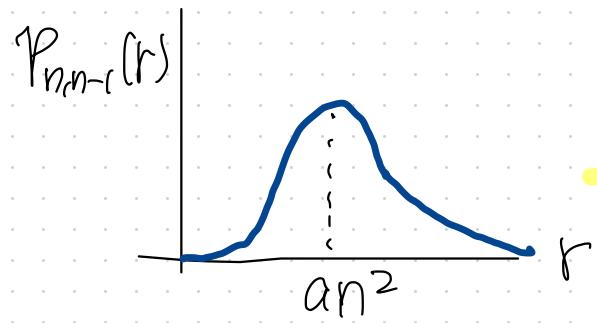
$$R_{n,n-1}(r) = \text{const. } r^{n-1} e^{-\frac{r}{an}} \quad (3)$$

存在確率密度

$$P_{n,n-1}(r) = |R_{n,n-1}(r)|^2 r^2 = \text{const. } r^{2n} e^{-\frac{2r}{an}} \quad (4)$$

$$\left(\begin{aligned} \left(r^{2n} e^{-\frac{2r}{an}} \right)' &= 2n r^{2n-1} e^{-\frac{2r}{an}} - r^{2n} \frac{2}{an} e^{-\frac{2r}{an}} \\ &= (an^2 - r) \frac{2r^{2n-1}}{an} e^{-\frac{2r}{an}} \end{aligned} \right) \quad (5)$$

$r = an^2$ で最大値



$l=0$ のとき ($n=1$)

$\Rightarrow r \approx a$ のとき

$(r \rightarrow 0)$ は落S5(11!)

$V=2$ のとき

$$l=n-2, \quad n=2, 3, 4, \dots$$

$$f_{n,n-2}(p) = C_1 p^{l+1} + C_2 p^{l+2} = C_1 p^{n-1} + C_2 p^n \quad (1)$$

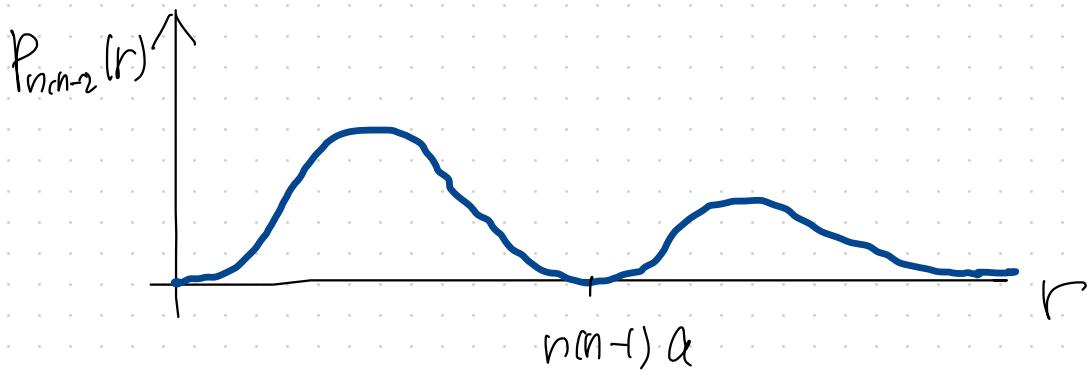
解の条件より

$$C_1 = -n(n-1)C_2 \quad (2)$$

よし

$$R_{n,n-2}(r) = \text{const.} \{ n(n-1)a - r^2 \} r^{n-2} e^{-\frac{r}{an}} \quad (3)$$

$$P_{n,n-2}(r) = \text{const.} \{ n(n-1)a - r^2 \} r^{2n-2} e^{-\frac{2r}{an}} \quad (4)$$



△ 水素原子の基底状態 (1S状態)

$n=1$ $l=m=0$ の時

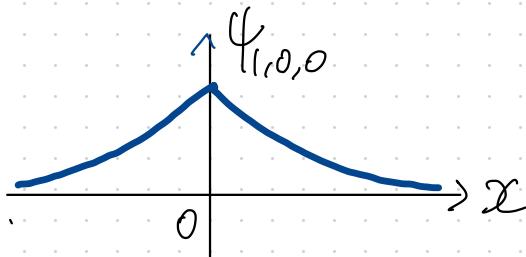
$$\Psi_{1,0,0}(x, y, z) = R_{1,0}(r) Y_0^0(\theta, \varphi) \quad (1)$$

$R_{1,0}(r) \rightarrow e^{-\frac{r}{a}}$ $Y_0^0(\theta, \varphi) \leftarrow \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$

$\text{P21-(3)} \rightarrow \text{II}$ $\text{II} \leftarrow \text{part 6-P25-(1)}$

よ2

$$\Psi_{1,0,0}(x, y, z) = \text{const. } e^{-\frac{\sqrt{x^2+y^2+z^2}}{a}} \quad (2)$$



$$(x, y, z) = (0, 0, 0)$$

z' 分不^可能

↓
1-R-71°アンビリ

半径

$$a = \frac{4\pi \epsilon_0 h^2}{\mu e^2} \approx 5.30 \times 10^{-10} \text{m} = 0.530 \text{\AA} \quad (3)$$

$$E_1 = -\frac{\hbar^2}{2Ma^2} \approx -2.18 \times 10^{-18} \text{J} \approx -13.6 \text{eV} \quad (4)$$

実験値と一致! → $\frac{1}{8}$ 原子

なぜ電子は陽子に落ちこまないのか？

直観的な説明

$$\text{金エネルギー } E = \frac{P^2}{2\mu} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad (1)$$

古典力学 $r \rightarrow 0$ とすれば $E \rightarrow -\infty$

エネルギーは 1) 32 も下がる。

量子力学 不確定性関係 $\Delta p \Delta r$ がある。

$$p \sim \frac{\hbar}{r} \text{ で (1) は } \lambda$$

$$E \sim \frac{\hbar^2}{2\mu r^2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad (2)$$

$$\text{これを最小にするのは } \left(\quad \right)' = -\frac{\hbar^2}{\mu r^3} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} = 0 \quad (3)$$

$$r \sim \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{\mu e^2} \quad \leftarrow a \text{ のもの!} \quad (4)$$

対応するエネルギーは E ,

不確定性関係があるので 水素原子は

安定！