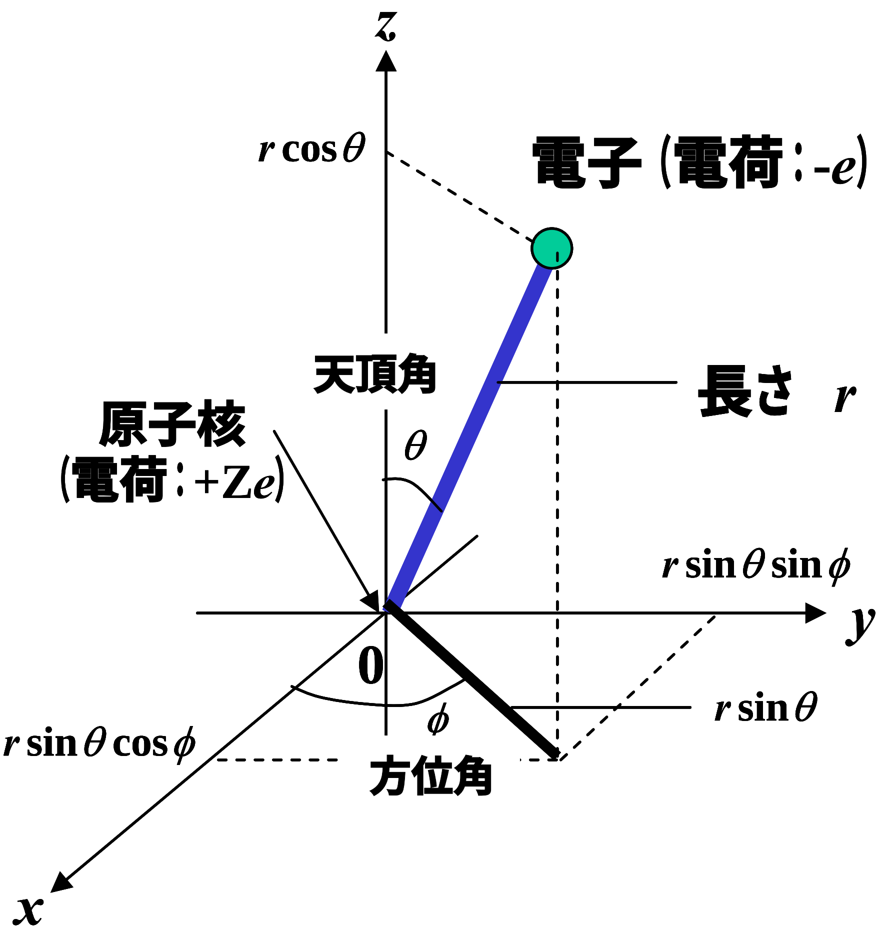
第4章　水素原子の波動関数

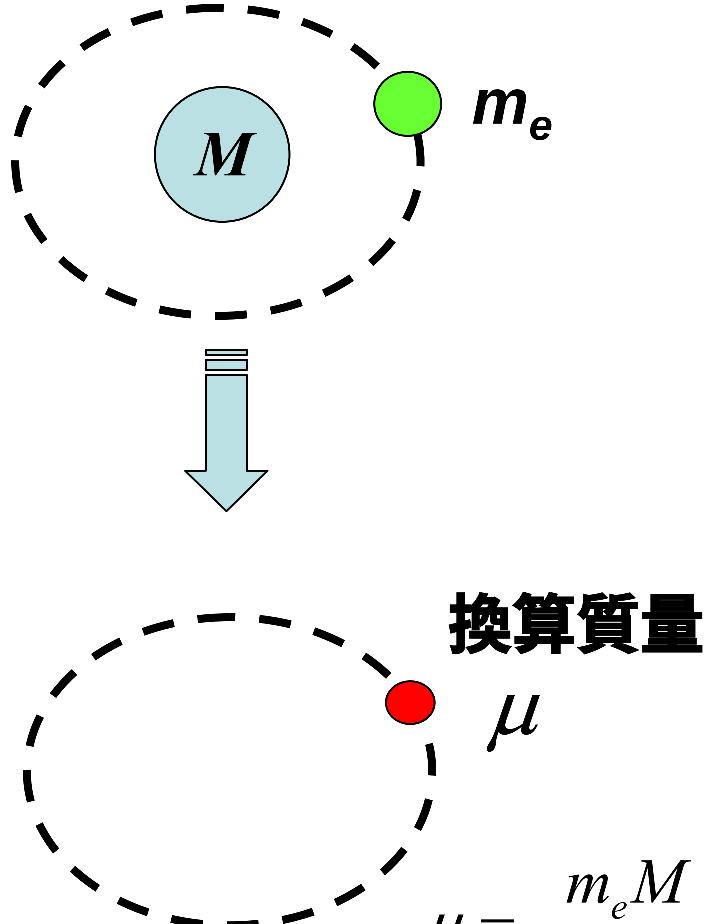
§４．１　水素原子のシュレディンガー方程式

§４．２　状態とエネルギー

§４．３　角運動量

§４．１　水素原子のシュレディンガー方程式





$$\mu = \frac{m_e M}{m_e + M}$$

電子のポテンシャルエネルギーは、

$$V=-\frac{\boldsymbol{Ze}^2}{4\pi\varepsilon_0 \boldsymbol{r}} \qquad \cdots\cdots(4\text{-}1)$$

(3-15)式より、

$$\left[-\frac{h^2}{8\pi^2\mu}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)+V\right]\psi=E\psi$$

これを極座標で表現すると波動方程式は、

$$\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial \psi}{\partial r}\right)+\frac{1}{r^2\sin^2\theta}\left(\frac{\partial^2\psi}{\partial r^2}\right)+\frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\psi}{\partial\theta}\right)$$

$$+\frac{8\pi^2\mu}{h^2}\left[E-V(r)\right]\Psi=0 \qquad \cdots\cdots(4\text{-}2)$$

解は、r, θ, ϕのそれぞれに変数分離した形で得られる。

$$\psi_{nlm}(r,\theta,\phi) = \underbrace{R_{nl}(r)}_{\text{動径波動関数}} \cdot \underbrace{\Theta_{lm}(\theta) \cdot \Phi_m(\phi)}_{\text{球面調和関数}} \qquad \cdots\cdots(4\text{-}3)$$

重要なことは、解に**三種類の量子数n, l, mが含まれていること**である。

一方、エネルギーは、量子数nのみに依存し、

$$E_n = -\frac{\mu e^4}{8\varepsilon_0{}^2 h^2} \cdot \frac{Z^2}{n^2} \qquad \cdots\cdots (4\text{-}4)$$

n = 1, 2, 3, 4,・・・（整数）　**主量子数**

→　***軌道の広がり***

l = 0, 1, 2, ・・・, n-1　**方位量子数**（n個）

→　***軌道の形***

m = -l, -l+1, ・・・, 0, 1, ・・・, +l　**磁気量子数**（2l+1個）