Maple での水素原子のエネルギー固有値の求め方　（$2p_1$ 軌道の場合）

> $with(VectorCalculus):$

> $SetCoordinates('spherical'[r, \mathrm{theta}, \mathrm{phi}]);$

> $f := \frac{r}{a} \cdot \exp\left(-\frac{r}{2a}\right) \exp(I \cdot \mathrm{phi}) \sin(\mathrm{theta})$

> $h\_f := -\frac{1}{2} \cdot Laplacian(f, [r, \mathrm{theta}, \mathrm{phi}]) - \frac{1}{r} \frac{1}{a} \cdot f$

> $simplify(h\_f)$

> $simplify\left(\frac{h\_f}{f}\right)$

(説明)

1 行目　ベクトル解析の計算をすることを宣言

2 行目　使う座標は極座標(spherical)　r, theta, phi だよと宣言。

3 行目　$2p_1$ 関数の定義 ここで角度関数や動径関数内の定数部分は簡単のためすべて省略

あくまで r, theta, phi にまつわるところのみ記述すればよい

(固有関数を定数倍しても固有値は変わらないので問題ない)

虚数は大文字の I で表す

ボーア定数(a0)は簡単のため a で表現

4 行目　h_f という関数(ハミルトニアンを作用した後の関数)を定義

$\frac{\hbar^2}{m}$ は第一項、第二項ともに出てくるのでいったん省略(5 行目の結果にあとでかければよい)

第一項：Laplacian は 2 階微分演算子の和の略称

$$\text{ラプラシアン}: \nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

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

$$\text{ナブラ}: \nabla = \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\partial}{\partial z} \end{pmatrix}$$

第二項：$\frac{\hbar^2}{m}$ をくくった残りのポテンシャル項

5 行目　4 行目の式を簡単にする命令

6 行目　5 行目ではまだ固有値がわかりにくいので、元の波動関数で割って、直接固有値を示す

(課題)

$3s_0$, $3p_1$, $3p_0$, $4s_0$ 軌道について Maple 求めるために必要な式を書け。

2 テーブルを 1 グループとし、Maple でエネルギーを計算せよ。

（どのグループがどの軌道を計算するかは指示する）