[17]ラプラシアン

$$\nabla^2=\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}$$ (直交座標)

$$\nabla^2=\underline{\left(\frac{1}{r^2}\right)\left(\frac{\partial}{\partial r}\right)\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)}^{\bigstar}+\left(\frac{1}{r^2\sin^2\theta}\right)\left(\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right)+\left(\frac{1}{r^2\sin\theta}\right)\left(\frac{\partial}{\partial\theta}\right)\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)$$ (極座標)

$\nabla^2 r$ を直交座標と極座標で計算し、一致するか確認せよ。

---

①直交座標の場合　$r=\left(x^2+y^2+z^2\right)^{1/2}$ より

$$\nabla^2 r=\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\left(x^2+y^2+z^2\right)^{1/2}$$

$\frac{\partial^2}{\partial x^2}$ だけやってみると

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2}\left(x^2+y^2+z^2\right)^{1/2}=\frac{\partial}{\partial x}\left[\frac{1}{2}2x\left(x^2+y^2+z^2\right)^{-1/2}\right]$$

$$=\left(x^2+y^2+z^2\right)^{-1/2}+\left(-\frac{1}{2}\right)(2x)x\left(x^2+y^2+z^2\right)^{-3/2}$$

$$=r^{-1}-x^2r^{-3}$$

同様に考えれば

$$\frac{\partial^2}{\partial y^2}r=r^{-1}-y^2r^{-3},\quad \frac{\partial^2}{\partial z^2}r=r^{-1}-z^2r^{-3}$$

全部足して

$$\therefore \nabla^2\left(x^2+y^2+z^2\right)^{1/2}=3r^{-1}-\left(x^2+y^2+z^2\right)r^{-3}$$

$$=3r^{-1}-r^2r^{-3}=\underline{2r^{-1}}$$ 答え

②極座標の場合

作用したい関数にϑ,φが含まれないので
★の項のみが、非ゼロの寄与を与える。

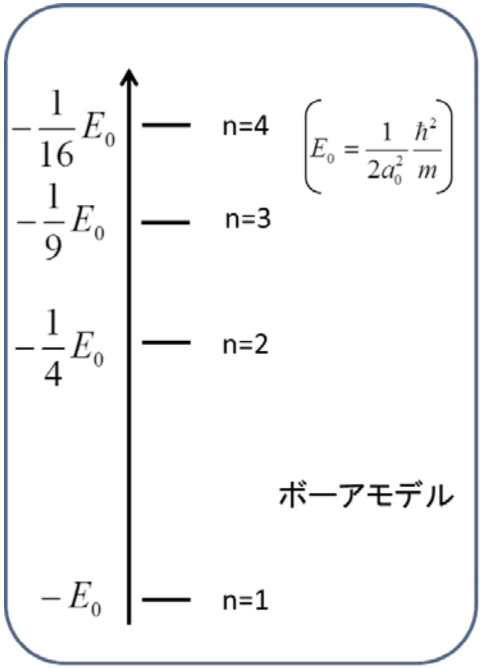
$$\nabla^2 r=\left(\frac{1}{r^2}\right)\left(\frac{\partial}{\partial r}\right)\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)r$$

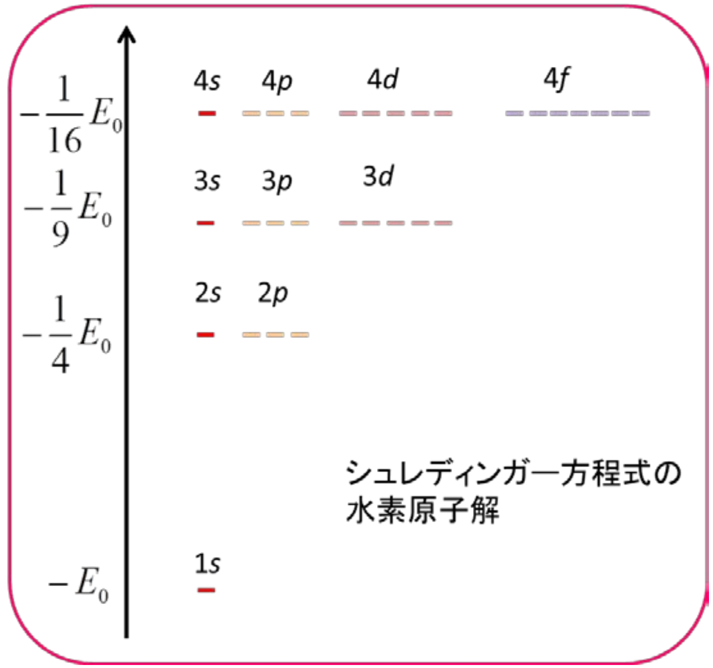
$$=\left(\frac{1}{r^2}\right)\left(\frac{\partial}{\partial r}\right)\left(r^2\cdot 1\right)=\left(\frac{1}{r^2}\right)2r=\underline{\frac{2}{r}}$$ 答え

両者の答えは一致し、極座標で書かれる関数への作用であれば、極座標形式のラプラシアンを用いる方が楽

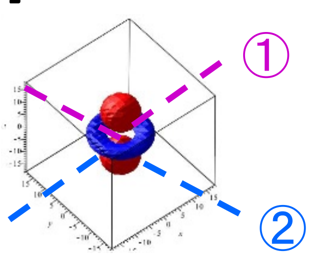
[18]　下記のボーアモデルの準位図の横に、水素原子のエネルギー準位図を記せ。

1sなどの軌道の名称も加えて書くこと。

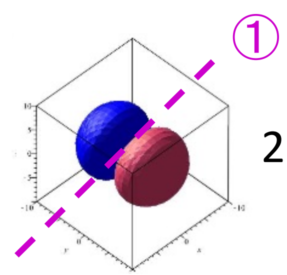




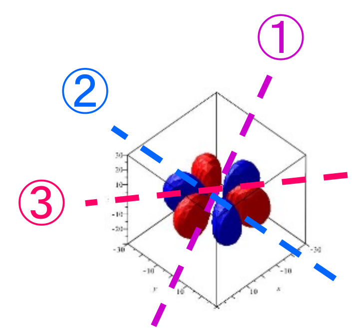
[19]



3d軌道



2p軌道



4f軌道

節面の数で見分けがつく。節面の数は1s,2p,3d,4fの場合、量子数*l*(エル) と同じ