[15]水素原子のシュレディンガー方程式の解

$$\hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2m}\left\{\underbrace{\left(\frac{1}{r^2}\right)\left(\frac{\partial}{\partial r}\right)\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)}_{①}+\underbrace{\left(\frac{1}{r^2\sin^2\theta}\right)\left(\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right)}_{②}+\underbrace{\left(\frac{1}{r^2\sin\theta}\right)\left(\frac{\partial}{\partial\theta}\right)\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)}_{③}\right\}-\underbrace{\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}}_{④}$$

方針

$\hat{H}$ を波動関数$\Psi_{1s}=A_{1s}\exp\left(-\frac{r}{a_0}\right)$ に作用させて、元の関数の定数倍になるか確認する。

$\hat{H}$ は4つの項があるので①～④にわけて作用させる。
ここで②と③に関しては、Ψ_{1s} がrのみの関数であることから、
ϑやφの偏微分値がゼロになるので①と④を行えばよい。

①を計算すると

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{1}{r^2}\right)\left(\frac{\partial}{\partial r}\right)\left(r^2\underbrace{\frac{\partial}{\partial r}\right)A_{1s}\exp\left(-\frac{r}{a_0}\right)}_{\text{まず一番右から計算(微分)}}=-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{1}{r^2}\right)\left(\frac{\partial}{\partial r}\right)\left(\underbrace{r^2\left(-\frac{1}{a_0}\right)A_{1s}\exp\left(-\frac{r}{a_0}\right)}_{r^2\text{をかけた、次はこれの微分}}\right)$$

$$=-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{1}{r^2}\right)\left(r^2\left(-\frac{1}{a_0}\right)^2A_{1s}\exp\left(-\frac{r}{a_0}\right)+2r\left(-\frac{1}{a_0}\right)A_{1s}\exp\left(-\frac{r}{a_0}\right)\right)$$

積の微分で2項
出てくることに注意

$$=-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\left(-\frac{1}{a_0}\right)^2A_{1s}\exp\left(-\frac{r}{a_0}\right)+\frac{2}{r}\left(-\frac{1}{a_0}\right)A_{1s}\exp\left(-\frac{r}{a_0}\right)\right)\qquad\text{...(i)}$$

[15]水素原子のシュレディンガー方程式の解

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left\{\underbrace{\left(\frac{1}{r^2}\right)\left(\frac{\partial}{\partial r}\right)\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)}_{①} + \underbrace{\left(\frac{1}{r^2\sin^2\theta}\right)\left(\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right)}_{②} + \underbrace{\left(\frac{1}{r^2\sin\theta}\right)\left(\frac{\partial}{\partial\theta}\right)\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)}_{③}\right\} \underbrace{-\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}}_{④}$$

④を計算するために $a_0 = \frac{4\pi\varepsilon_0}{e^2}\frac{\hbar^2}{m}$ を $\underline{\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0} = \frac{\hbar^2}{ma_0}}$ と変形すると

$$-\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}A_{1s}\exp\left(-\frac{r}{a_0}\right) = -\frac{\hbar^2}{ma_0 r}A_{1s}\exp\left(-\frac{r}{a_0}\right) \qquad \text{...(ii)}$$

これは、ボーアモデルのn=1のエネルギーに等しい

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{me^2}{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}\right)^2 = -\frac{me^4}{8h^2\varepsilon_0^2}$$

(i)と(ii)を足すと、$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\left(-\frac{1}{a_0}\right)^2 - \frac{2}{a_0 r} + \frac{2}{a_0 r}\right)A_{1s}\exp\left(-\frac{r}{a_0}\right)$

$$= \underbrace{\boxed{-\frac{\hbar^2}{2ma_0^2}}}_{\text{定数倍の固有値}} \underbrace{A_{1s}\exp\left(-\frac{r}{a_0}\right)}_{\text{元の波動関数}}$$

答え $E_{1s} = -\frac{\hbar^2}{2ma_0^2}$

[16]

n(主量子数) = 1, 2, ...　高校で習うところの K 殻、L 殻、M 殻を表す。

l(方位量子数) = 0, ..., n-1　軌道角運動量の量子数。それぞれ *s, p, d, f* と軌道と呼ばれる。

m(磁気量子数) = - l, - l+1, ..., l - 1, l　2l+1 個存在。磁場や電場をかけない限り縮退する。