ＸＸＸＩＩ　３次元でのＳｃｈｒöｄｉｎｇｅｒ方程式

【Ｓｃｈｒöｄｉｎｇｅｒ方程式】

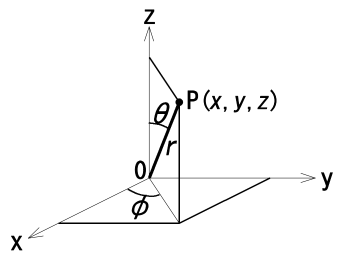
［直交座標系］

$$\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\phi}{\partial y^2}+\frac{\partial^2\phi}{\partial z^2}+\frac{8\pi^2 m_e}{h^2}(E-V)\phi = 0 \qquad (32\cdot 1)$$

$$\nabla^2\phi + \frac{8\pi^2 m_e}{h^2}(E-V)\phi = 0 \qquad (32\cdot 2)$$

$$\nabla^2 \equiv \frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2} \quad \text{: Laplacian} \qquad (32\cdot 3)$$

［極座標系］



$$x = r\sin\theta\ \cos\phi \qquad (32\cdot 4)$$

$$y = r\sin\theta\ \sin\phi \qquad (32\cdot 5)$$

$$z = r\cos\theta \qquad (32\cdot 6)$$

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

$$+\frac{8\pi^2 m_e}{h^2}(E-V)\phi = 0 \qquad (32\cdot 7)$$

$$\nabla^2\phi + \frac{8\pi^2 m_e}{h^2}(E-V)\phi = 0 \qquad (32\cdot 8)$$

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

(３２・９)

［ハミルトン演算子］

$$\mathrm{H}\phi = E\phi \qquad (32\cdot 10)$$

$$\mathrm{H} \equiv -\frac{h^2}{8\pi^2 m_e}\nabla^2 + V \quad \text{: Hamiltonian} \qquad (32\cdot 11)$$

【水素(型)原子】

［ポテンシャル］

$$V = -\frac{z e^2}{4\pi\varepsilon_0 r} \qquad (32\cdot 12)$$

Ｈ（z＝１），He^{+}（z＝２），Li^{2+}（z＝３）

［波動関数］

$$\phi_{1,0,0} = \frac{1}{\sqrt{\pi}}\left(\frac{z}{a_o}\right)^{3/2} e^{-\rho/2} \qquad ：1s \qquad (32\cdot13)$$

$$\phi_{2,0,0} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}}\left(\frac{z}{a_o}\right)^{3/2}(2-\rho)\, e^{-\rho/2} \qquad ：2s \qquad (32\cdot14)$$

$$\phi_{2,1,-1} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}}\left(\frac{z}{a_o}\right)^{3/2}\rho\, e^{-\rho/2}\sin\theta\ \sin\phi \qquad ：2p_y \qquad (32\cdot15)$$

$$\phi_{2,1,0} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}}\left(\frac{z}{a_o}\right)^{3/2}\rho\, e^{-\rho/2}\cos\theta \qquad ：2p_z \qquad (32\cdot16)$$

$$\phi_{2,1,1} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}}\left(\frac{z}{a_o}\right)^{3/2}\rho\, e^{-\rho/2}\sin\theta\ \cos\phi \qquad 2p_x \qquad (32\cdot17)$$

$$\phi_{3,0,0} = \frac{1}{18\sqrt{3\pi}}\left(\frac{z}{a_o}\right)^{3/2}(6-6\rho-\rho^2)\, e^{-\rho/2} \qquad ：3s \qquad (32\cdot18)$$

$$a_o \equiv \frac{4\pi\varepsilon_o\hbar^2}{m_e e^2} \qquad \text{（ボーア半径）} \qquad (32\cdot19)$$

$$\hbar \equiv \frac{h}{2\pi} \qquad (32\cdot20)$$

$$\rho \equiv \frac{2zr}{na_o} \qquad \text{（r：原子核と電子との距離）} \qquad (32\cdot21)$$

［問３２・１］ボーア半径 a_o を求めよ。

［問３２・２］水素(型)原子でのそれぞれの電子の波動関数のおおよその形を図示せよ。

［波動関数のエネルギー］

$$E = -\frac{z^2 e^2}{8\pi\varepsilon_o a_o n^2} \qquad (32\cdot22)$$

［問３２・３］水素原子は，つぎの波長 λ／nm の電磁波を出す。　このことを，水素原子の電子の波動関数の持つエネルギーから説明せよ。

９３.７８２	９４.９７６	９７.２５４	１０２.５８３	１２１.５６６
３７９.７９０	３８３.５３９	３８８.９０５	３９７.００７	４１０.１７４
４３４.０４７	４８６.１３３	６５６.２７９	９５４.６２	１００４.９８
１０９３.８	１２８１.８１	１８７５.１１	２６３０	４０５０
７４００				