

3.5. 動径分布関数

- 目的:
電子の分布を、よりわかりやすく表示するために導入
- 半径 r の“殻”に、電子を見いだす確率を考える。
→ $r \sim r+dr$ の二つの球面の間に電子を見いだす確率
動径分布
$$D(r) = \int_0^\pi \int_0^{2\pi} |\psi(r, \theta, \phi)|^2 r^2 \sin \theta d\theta d\phi$$

密度 微小体積要素
注意: $\int_0^\infty D(r) dr = 1$

3.5. 動径分布関数

- 微小体積要素について

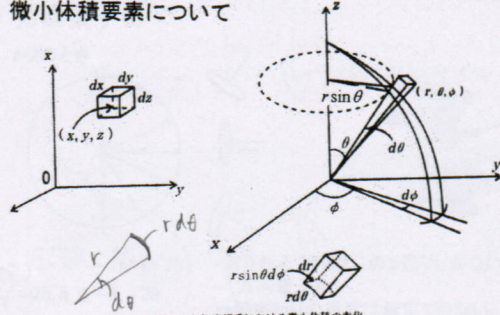


図 4.2 軸座標系における微小体積の変化

高塚和夫、化学結合論入門

3.5. 動径分布関数

- 例: 1s

$$D(r) = \int_0^\pi \int_0^{2\pi} |R_{10}(r)|^2 |Y_{00}(\theta, \phi)|^2 r^2 \sin \theta d\theta d\phi$$

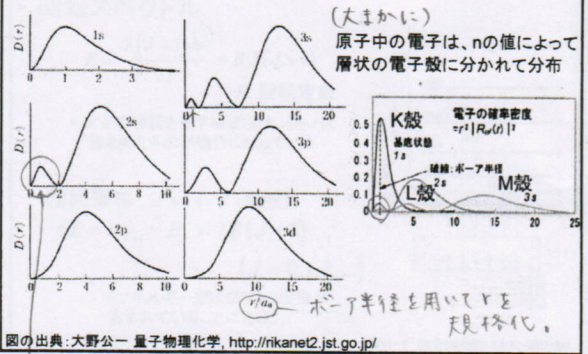
$$= r^2 |R_{10}(r)|^2 \left(\because |Y_{00}(\theta, \phi)|^2 = 1/4\pi \right) \quad Y \text{ の積分: 半径 } 1 \text{ の球の表面積}$$

$$= 4 \left(\frac{Z}{a_B} \right)^3 r^2 \exp\left(-\frac{2Zr}{a_B}\right)$$

問3-8: $Z=1$ について、1s軌道の動径分布が最大を与えるところはボア半径となることを示せ。

(電子の動径分布は、 n の値が増すほど核から遠く離れた位置で最大を示す。具体的には次のスライド)

3.5. 動径分布関数



図の出典: 大野公一 量子物理化学, <http://rikane2.jst.go.jp/>

浸透 (3.8参照)

2sは2pより原子核の近く

→ エネルギー的により安定