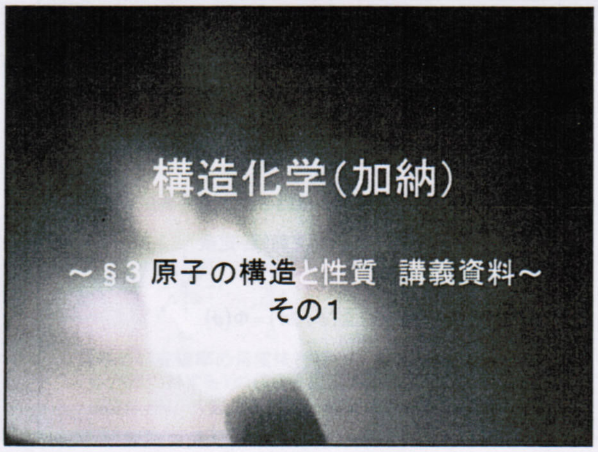
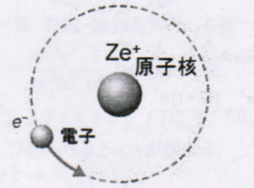


3.1. 水素(様)原子のSchrödinger方程式

- 扱う対象
  - 原子番号Zの原子核(質量M)と一個の電子(質量m)からなる系
  - 例: H, He^+, Li^{2+}, …



図の出典: http://rikanet2.jst.go.jp/

陽子は電子の約1800倍重い

3.1. 水素(様)原子のSchrödinger方程式

- ハミルトニアン

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}$$

  - $\hat{V}$: Coulomb(クーロン)ポテンシャルエネルギー

$$V = -\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Ze^2}{r} \quad \Rightarrow \quad \hat{V} = -\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Ze^2}{r} \quad (\because \hat{r} \to r)$$

  - $\hat{T}$: (相対)運動エネルギー

問3-1: 重心運動と相対運動を分離せよ(板書)
$(\mu = m_1 m_2/(m_1+m_2) \approx m_2)$

$$T = \frac{1}{2\mu}\left(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2\right)$$

$$\Rightarrow \quad \hat{T} = -\frac{h^2}{2\mu}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) \equiv -\frac{h^2}{2\mu}\nabla^2$$

$$\left(\because \hat{p}_x \to -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)$$

3.1. 水素(様)原子のSchrödinger方程式

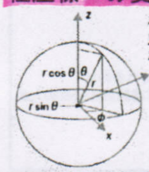
- Schrödinger方程式

$$\left(\hat{T} + \hat{V}\right)\psi = E\psi$$

$$\Rightarrow \quad \left[-\frac{h^2}{2\mu}\nabla^2 - \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Ze^2}{r}\right]\psi = E\psi$$

- 極座標への変換

"球状"のものをとり扱うには、極座標!!



$$x = r\sin\theta\cos\phi$$
$$y = r\sin\theta\sin\phi$$
$$z = r\cos\theta$$

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

問3-2: これを示せ(ヒント板書)

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

問3-1. ヒント

$$\begin{cases} M = m_1 + m_2 \\ P_G = P_1 + P_2 \\ \mu = 略 \\ P = \mu\left(\dfrac{P_2}{m_2} - \dfrac{P_1}{m_1}\right) \end{cases}$$

$$\underbrace{\frac{P_1^2}{2m_1}}_{核} + \underbrace{\frac{P_2^2}{2m_2}}_{電子} = \frac{P_G^2}{2M} + \frac{P^2}{2\mu}$$

二体問題を一体問題として考える

3.1. 水素(様)原子のSchrödinger方程式

- 極座標表示でのSchrödinger方程式

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

ただし

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

とおくと、

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2}\hat{\Lambda}^2\right) - \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Ze^2}{r}\right]\psi(r,\theta,\phi) = E\psi(r,\theta,\phi) \quad \ldots(0)$$

- Schrödinger方程式の解
  - 変数分離

$$\psi(r,\theta,\phi) = \underbrace{R(r)}_{動径成分}\underbrace{Y(\theta,\phi)}_{角度成分}$$

r^2を乗じると、
$\begin{cases} r\text{のみ、} \\ (\theta,\phi)\text{のみ、} \end{cases}$
の項に分類できる。

3.1. 水素(様)原子のSchrödinger方程式

- 変数分離

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2}\hat{\Lambda}^2\right) - \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Ze^2}{r}\right]R(r)Y(\theta,\phi) = E\,R(r)Y(\theta,\phi)$$

$$\Rightarrow \quad -\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(Y\frac{\partial^2 R}{\partial r^2} + \frac{2Y}{r}\frac{\partial R}{\partial r} + \frac{R}{r^2}\hat{\Lambda}^2 Y\right) - \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Ze^2}{r}RY = E\,RY$$

両辺に $\frac{r^2}{RY}$ を乗じると

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu R}\left(r^2\frac{\partial^2 R}{\partial r^2} + 2r\frac{\partial R}{\partial r}\right) + r^2\left(E - \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Ze^2}{r}\right) \quad r\text{だけの関数}$$

$$= \frac{\hbar^2}{2\mu Y}\hat{\Lambda}^2 Y \boxed{= \lambda \equiv -\frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu}}$$

θ, ϕだけの関数