

2. $n=2$ のとき

B22式より, $l=1, 0$. $l=1$ のとき, $m=-1, 0, 1$. $l=0$ のとき, $m=0$. 従って, (n, l, m) として, $(2, 1, -1)$, $(2, 1, 0)$, $(2, 1, 1)$, $(2, 0, 0)$ の 4 つ組合せがある. $n=2, l=1$ で指定される状態を $2p$ 軌道, $n=2, l=0$ で指定される状態を $2s$ 軌道という. 以下では, $2p_z$ 軌道の特徴を見てみよう.

$$\psi_{2,1,0}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{1}{2\pi a_0^5}} r \exp\left(-\frac{r}{2a_0}\right) \cos \theta$$

この軌道は, 偏角 θ を含むので, 方向性がある(図 6 参照). また, xy 平面 ($\theta=\pi/2$) では, $\cos \theta=0$ となるから, 節が現れる.

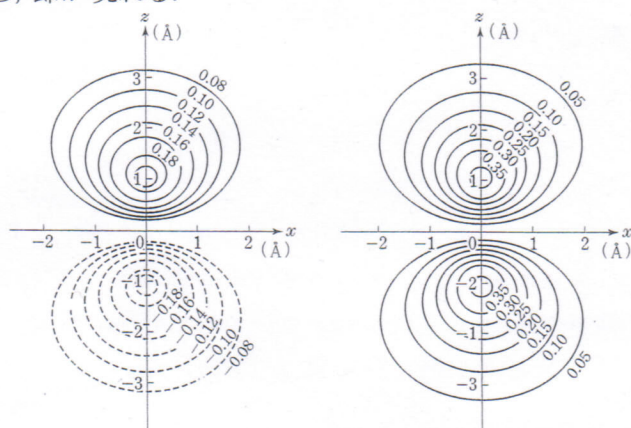


図 6. 水素原子の $2p_z$ 軌道(左)とその 2 乗(右).

蛇足ではあるが, 数学大好きの人のために, Schrödinger 方程式という微分方程式に $1s$ 軌道という関数を代入すれば, $1s$ 準位のエネルギーが得られることを確かめておこう. これには,

$$H\psi = E\psi$$

の両辺に左側から ψ を掛けて全空間で積分すると,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi H \psi dx dy dz = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi E \psi dx dy dz = E \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^2 dx dy dz$$

より,

$$E = \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi H \psi dx dy dz}{\int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^2 dx dy dz}$$

を計算すればよい. 全空間で積分するのは, $1s$ 軌道が規格化されていれば, 上の第 3 式が E になるから. 極座標で表すと,

$$E = \frac{\int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \psi H \psi \cdot r^2 \sin \theta dr d\theta d\phi}{\int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \psi^2 \cdot r^2 \sin \theta dr d\theta d\phi}$$

となる. ちなみに, $1s$ 軌道,

$$\psi = \sqrt{\frac{1}{\pi a_0^3}} \exp\left(-\frac{r}{a_0}\right)$$