

## 4 式 (6.8) を解く ( $R(r)$ を求める)

$R(r)$  は極座標で表した波動関数  $\psi(r, \theta, \phi)$  の  $r$ (動径) に依存する部分。 ( $\psi(r, \theta, \phi) = R(r)\Theta(\theta)\Phi(\phi)$ )

$$-\frac{1}{R(r)} \left[ \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{2m_e r^2}{\hbar^2} \left( \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} + E \right) R(r) \right] = -\beta \quad (6.8)$$

$\beta = l(l+1)$  ( $l$  は  $l = 0, 1, 2, \dots$ ), また  $l+1 \leq n$  の時に上式は解を持ち、次の特殊関数を含んだ式が上式の解であることが知られている。

$$R(r) = \left\{ \frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]^3} \right\}^{1/2} \left( \frac{2}{na_0} \right)^{l+3/2} r^l L_{n+l}^{2l+1} \left( \frac{2r}{na_0} \right) \exp \left( -\frac{r}{na_0} \right) \quad (6.47)$$

( $n = \underline{\hspace{2cm}}$ )  
( $l = \underline{\hspace{2cm}}$ )

$a_0$  はボーア半径 ( $a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{m_e e^2}$ )。  $L_{n+l}^{2l+1}(\xi)$  は ラゲールの陪多項式と呼ばれる特殊関数である。

表 2 ラゲールの陪多項式  $L_{n+l}^{2l+1}(\xi)$  と  $R_{nl}(r)$  (p.223 表 6.4)

$n$	$l$	$L_{n+l}^{2l+1}(\xi)$	$R_{nl}(r)$
1	0	$L_1^1(\xi) = -1$	$R_{10} = 2 \left( \frac{1}{a_0} \right)^{3/2} e^{-r/a_0}$
2	0	$L_2^1(\xi) = -2!(2 - \xi)$	$R_{20} = \frac{1}{2\sqrt{2}} \left( \frac{1}{a_0} \right)^{5/2} (2a_0 - r) e^{-r/2a_0}$
2	1	$L_3^3(\xi) = -3!$	$R_{21} = \frac{1}{2\sqrt{6}} \left( \frac{1}{a_0} \right)^{5/2} r e^{-r/2a_0}$
3	0	$L_3^1(\xi) = -3!(3 - 3\xi + \frac{1}{2}\xi^2)$	$R_{30} = \frac{2}{81\sqrt{3}} \left( \frac{1}{a_0} \right)^{7/2} (27a_0^2 - 18a_0r + 2r^2) e^{-r/3a_0}$
3	1	$L_4^3(\xi) = -4!(4 - \xi)$	$R_{31} = \frac{4}{81\sqrt{6}} \left( \frac{1}{a_0} \right)^{7/2} (6a_0 - r) r e^{-r/3a_0}$
3	2	$L_5^5(\xi) = -5!$	$R_{32} = \frac{4}{81\sqrt{30}} \left( \frac{1}{a_0} \right)^{7/2} r^2 e^{-r/3a_0}$
4	0	$L_4^1(\xi) = -4!(4 - 6\xi + 2\xi^2 - \frac{1}{6}\xi^3)$	$R_{40} = \frac{1}{768} \left( \frac{1}{a_0} \right)^{9/2} (192a_0^3 - 144a_0^2r + 24a_0r^2 - r^3) e^{-r/4a_0}$
4	1	$L_5^3(\xi) = -5!(10 - 5\xi + \frac{1}{2}\xi^2)$	$R_{41} = \frac{1}{256\sqrt{15}} \left( \frac{1}{a_0} \right)^{9/2} (80a_0^2 - 20a_0r + r^2) r e^{-r/4a_0}$
4	2	$L_6^5(\xi) = -6!(6 - \xi)$	$R_{42} = \frac{1}{768\sqrt{5}} \left( \frac{1}{a_0} \right)^{9/2} (12a_0 - r) r^2 e^{-r/4a_0}$
4	3	$L_7^7(\xi) = -7!$	$R_{43} = \frac{1}{768\sqrt{35}} \left( \frac{1}{a_0} \right)^{9/2} r^3 e^{-r/4a_0}$

$R(r)$  は 2つの量子数  $n$  と  $l$  に依存する。 $n$  は主量子数という。 $l$  は角運動量量子数で、 $Y(\theta, \phi)$  で出てきた  $l$  と同じものである。

表 4 に与えられた  $R(r)$  は複雑に見えるが、一つの多項式と、一つの指数関数と、規格化定数を掛けた合わせただけの関数である。

例 
$$R_{31} = \underbrace{\frac{4}{81\sqrt{6}} \left( \frac{1}{a_0} \right)^{7/2}}_{\text{規格化定数}} \underbrace{(6a_0 - r) r}_{r \text{ の } (n-1) \text{ 次式}} \underbrace{e^{-r/3a_0}}_{\text{指数減少関数}}$$

$R(r)$  を図示してみよう。

左側は  $R(r)$  そのものを、

右側は  $4\pi r^2 R^2(r)$  を

上から順に  $n = 1, n = 2, n = 3$  について示してある。

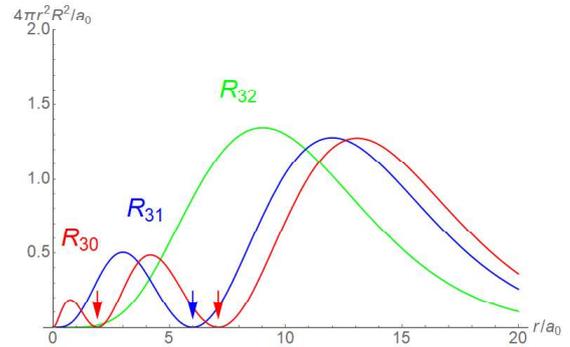
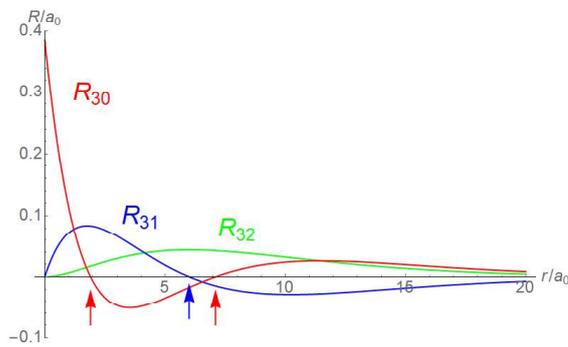
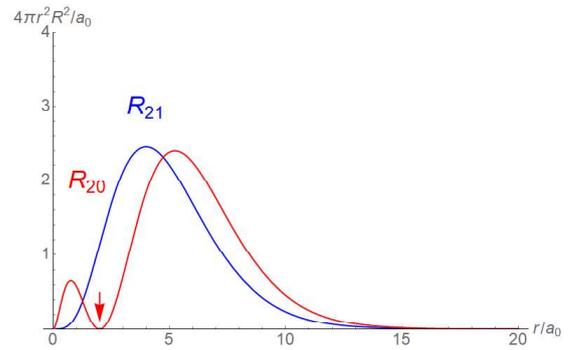
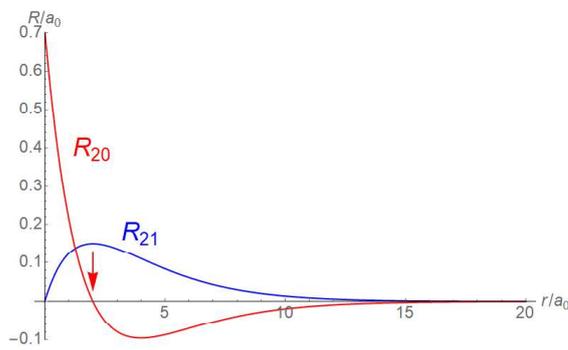
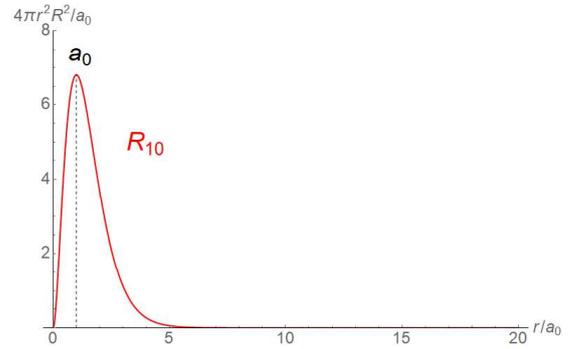
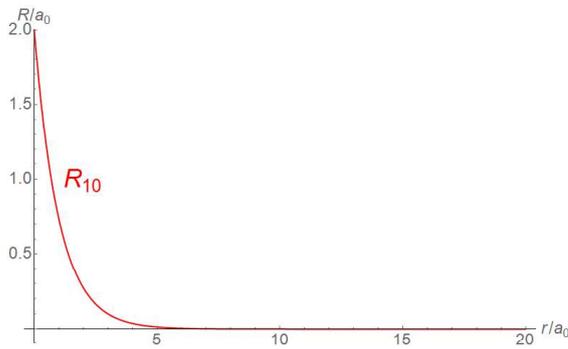


図1 水素原子の電子の波動関数の動径部分  $R(r)$

図2 球殻  $dr$  中に電子の存在する確率  $4\pi r^2 R^2(r)$

左側、 $R(r)$  は水素原子中の電子の波動関数の動径部分である。これを2乗した値が存在確率になる。赤は  $l = 0$  (s オービタル) である。値が0となるところが  $n - 1$  個ある。これは、s オービタルには、 $n - 1$  個の球状の節面 (ふしめん) があることを示している。

青は  $l = 1$  (p オービタル) である。値が0となるところが  $n - 2$  個ある。これは、p オービタルには、 $n - 2$  個の球状の節面があることを示している。

緑は  $l = 2$  (d オービタル) である。図には示されていないが、同様に d オービタルには  $n - 3$  個の球状の節面がある。

一般に、 $R(r)$  は、 $n - l - 1$  個の節を持っている。

右側、 $4\pi r^2 R^2(r)$  は、 $R(r)$  を2乗して存在確率とし、球の表面積  $4\pi r^2$  をかけて、半径  $r \sim r + dr$  に電子が存在する確率を示したものである。 $n$  が大きくなるにつれて、原子核からの距離  $r$  の大きいところに電子が存在する傾向があることがわかる。

1s 軌道に相当する  $R_{10}(r)$  では、確率の最大値が  $a_0$  になっていることは特筆に値する。波動関数を使い計算された、電子の存在確率が最大となる距離はボーア半径に一致する。