プランク定数 ÷ 2π

定数だったよな

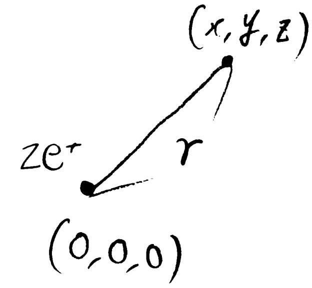
ハミルトニアン

$$\hat{H}\psi_{nlm}(x, y, z) = E\psi_{nlm}(x, y, z)$$

原子核の電荷(電子数)

ハ

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) - \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Ze^2}{r}$$



$$E_n = -\frac{m^2 Z^2 e^4}{32\varepsilon_0\pi^2\hbar^2}\cdot\frac{1}{n^2}$$

$\boxed{n}$のみに依存

Bohrの理論~~と~~が一致している(偶然?)

量子数n, l, mのn

とびとびのエネルギー準位が得られるのは、

ψが物理的に意味がある関数であり、

全(変数)領域において連続，一価，有限で

$$\int_{-\infty}^{\infty}dx\int_{-\infty}^{\infty}dy\int_{-\infty}^{\infty}dz\,|\psi|^2 < \infty$$

でなければならないという条件があるからである。

$|\psi(x, y, z)|^2\,dx\,dy\,dz$: 存在確率

これは、$\oint p\,dq = nh$ より自然な形になっているし、

水素以外も正しく計算できる。

$$\left(\begin{array}{l} \int d\tau\, |\psi|^2 = M \\ \frac{1}{\sqrt{M}}\psi = \psi' \\ \int d\tau\, |\psi'|^2 = 1 \end{array} \right)$$

主量子数

$n = 1, 2, 3, \ldots$

方位量子数

$l = 0, 1, 2, \ldots, n-1$

磁気量子数

$m = 0, \pm 1, \ldots, \pm l$

$$\left(\begin{array}{ll} n=1 & \text{K殻} \\ 2 & \text{L殻} \\ 3 & \text{M殻} \end{array} \right)$$

(l にニックネームがついてて、

$l = 0,\ 1,\ 2,\ 3,\ \ldots$

s p d f g h ...

sharp principal diffuse)

例えば軌道の名前を

$n=1,\quad l=0$ だと $1s$ とか
$2\quad 1\quad 2p$ とか
$4\quad 3\quad 4f$ とか　楽をしようと

定常状態の波動関数の特長

$$\psi_{nlm}(r,\theta,\phi) = \underbrace{R_{nl}(r)}_{\text{動径部分}}\ \underbrace{\Theta_{lm}(\theta)\,\Phi_m(\phi)}_{\text{角度部分}}$$

波動関数　極座標

rに依存する関数　　θ, ϕ に依存する関数

$$\boxed{R_{nl}(r)},\quad \boxed{\Theta_{lm}(\theta)\in\mathbb{R},\quad \Phi_m(\phi) = e^{im\phi}\in\mathbb{C}}$$

$$Y_{lm}(\theta,\phi) = \Theta_{lm}(\theta)\,\Phi_m(\phi)$$ 球面調和関数

同じnlに属している

$\Phi_m(\phi)$ は複数関数。
描きやすいように実関数にするため、角度部分をくみなおす

$$Y_{10}\rightarrow Y_{pz}\qquad Y_{20}\rightarrow Y_{dz^2}$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(Y_{11}+Y_{1-1})\rightarrow Y_{px}\qquad \frac{1}{\sqrt{2}}(Y_{21}+Y_{2-1})\rightarrow Y_{dzx}$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}i}(Y_{11}-Y_{1-1})\rightarrow Y_{py}\qquad \frac{1}{\sqrt{2}i}(Y_{21}-Y_{2-1})\rightarrow Y_{dyz}$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(Y_{22} + Y_{2-2}) \rightarrow Y_{d_{x^2-y^2}}$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}i}(Y_{22} - Y_{2-2}) \rightarrow Y_{dxy}$$

cf. $e^{im\phi} + e^{-im\phi} = \cos\theta$

$$\frac{1}{i}\left(e^{im\phi} + e^{-im\phi}\right) = \sin\theta$$

$n=1$ のケース，$l=1$ に対応するケースは

~~3〜5つ作りだしている~~ 3つ？つくりだしている $\boxed{P_z, P_x, P_x}$

$l=2$ に対する種類は 5つあったけど，

$\boxed{d_{z^2} \quad d_{zx} \quad d_{yz} \quad d_{x^2-y^2} \quad d_{xy}}$ 過不足ない

$\hat{H}\Psi = E\Psi$ について．

$2p$ については，

Ψ_{211}，Ψ_{210}，Ψ_{21-1} がいるんだけど．

$$\begin{array}{ccc} \Psi_{211} & \Psi_{210} & \Psi_{21-1} \\ \downarrow & \downarrow & \downarrow \\ R_{21}Y_{11} & R_{21}Y_{10} & R_{21}Y_{1-1} \end{array}$$

$$\Psi_{p_x} = R_{21}\frac{1}{\sqrt{2}}(Y_{11} + Y_{1-1})$$

$$\begin{cases} H\psi_{211} = E_2\psi_{211} \\ H\psi_{21-1} = E_2\psi_{21-1} \end{cases}$$

nだけに依存する定数?

$$\downarrow$$

$$\hat{H}(\psi_{211} + \psi_{21-1}) = \hat{H}\psi_{211} + \hat{H}\psi_{21-1}$$
$$= E_2\psi_{211} + E_2\psi_{21-1}$$
$$= E_2(\psi_{211} + \psi_{21-1})$$

(資料、軌道)

原子オービタル?が0になるところを節(node)というけど、

- 節(node)の数

エネルギーが大きくなると、節の数がふえる

		動径	角度	
$n=1$		0		0こ
$n=2$	2s	1	0	1こ
	2p	0	1	
$n=3$	3s	2	0	2こ
	3p	1	1	
	3d	0	2	

関連した重要な特徴として、

- 縮重度 （同じエネルギーに属する独立な波動関数の数）

$n=1$　　1s
$n=2$　　2s，2p(3つ)
$n=3$　　3s，3p(3つ)，3d(5つ)

主量子数 n（のエネルギー？）の縮重度は n^2 とわかる