水素原子 Part 3

☆動径関数 $R(r)$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{d}{dr}R\right)-k\frac{e^2}{r}R+\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}R=ER$$

$\hat{L}^2 Y=\hbar^2\lambda Y$
$\lambda=l(l+1)$

rを無次元化 $\rho=r/a_0$

a_0：ボーア半径

$$a_0=\frac{\varepsilon_0 h^2}{\pi m e^2}=\frac{\hbar^2}{kme^2}\quad\left(k=\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\right)$$

a_0：ボーア半径

$$a_0=\frac{\varepsilon_0 h^2}{\pi m e^2}=\frac{\hbar^2}{kme^2}$$

$$\frac{1}{a_0^2}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\right)\frac{1}{\rho^2}\frac{d}{d\rho}\left(\rho^2\frac{dR}{d\rho}\right)-\frac{ke^2}{a_0\rho}R+\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2ma_0^2\rho^2}R=ER$$

両辺に $-\frac{2ma_0^2}{\hbar^2}$ をかけると.

$$\frac{1}{\rho^2}\frac{d}{d\rho}\left(\rho^2\frac{dR}{d\rho}\right)+2\underbrace{\frac{kme^2}{\hbar^2}a_0}_{1}\frac{R}{\rho}-\frac{l(l+1)}{\rho^2}R+\frac{2ma_0^2}{\hbar^2}ER=0$$

$\varepsilon=-\frac{2ma_0^2}{\hbar^2}E$ として整理

$$\frac{1}{\rho^2}\frac{d}{d\rho}\left(\rho^2\frac{dR}{d\rho}\right)+\frac{2}{\rho}R-\frac{l(l+1)}{\rho^2}R-\varepsilon R=0$$

- $\rho\to 0$ のとき $R\sim\rho^t$ $(t\geq 0)$ 最小次の項

  ρ^{t-2} の係数 $t(t+1)-l(l+1)=0$

  $t=l,\ -l-1$ (不適)

- $\rho\to\infty$ のとき

  $$\frac{d^2R}{d\rho^2}-\varepsilon R=0$$

  $R=C_1 e^{\sqrt{\varepsilon}\rho}+C_2 e^{\sqrt{\varepsilon}\rho}$

  $\rho\to\infty$ のとき $R\to 0$ より $R=C_2 e^{-\sqrt{\varepsilon}\rho}$

よって $R=\rho^l e^{-\sqrt{\varepsilon}\rho}\cdot L(\rho)$

$$L(\rho)=\rho^{n'}+C_{n-1}\rho^{n'-1}+C_{n-2}\rho^{n'-2}+\cdots$$

- $n'=0$ のときの $\rho^{l-1}e^{-\sqrt{\varepsilon}\rho}$ の係数

  $$-2\sqrt{\varepsilon}(l+1)+2=0$$
  $$\varepsilon=\frac{1}{(l+1)^2}$$
  $$E=-\frac{\hbar^2}{2ma_0^2}\frac{1}{(l+1)^2}$$

- $n'\neq 0$ のとき

  $\rho^{n'+l-1}e^{-\sqrt{\varepsilon}\rho}$ の係数

  $$-2\sqrt{\varepsilon}(n'+l+1)+2=0$$
  $$\varepsilon=\frac{1}{(n'+l+1)^2}$$
  $$E=-\frac{\hbar^2}{2ma_0^2}\frac{1}{(n'+l+1)^2}$$

$n'+l+1$ を n としておくと,

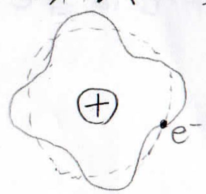
$$E=-\frac{\hbar^2}{2ma_0^2}\frac{1}{n^2}$$

n：主量子数

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

練習問題

シュレディンガー方程式とボーアの原子モデルのエネルギー準位が等しくなることを確認



$$\begin{cases} m\dfrac{v^2}{r}=k\dfrac{e^2}{r^2} \\ 2\pi r=n\dfrac{h}{mv} \end{cases}\quad(n=1,2,3,\cdots)$$

答え

$$v^2 = \left(\frac{nh}{2\pi r m}\right)^2 = \frac{ke^2}{mr}$$

$$n^2h^2 = 4\pi^2 m k e^2 r$$

$$r = \frac{n^2h^2}{4\pi^2 m k e^2}$$

$$= \frac{\varepsilon_0 h^2}{\pi m e^2} n^2$$

$$= a_0 n^2$$

$$v^2 = \frac{ke^2}{mr}$$

$$v = \sqrt{\frac{k}{m a_0}}\, e \cdot \frac{1}{n}$$

$$E = \frac{1}{2} m v^2 - k\frac{e^2}{r}$$

$$= \frac{ke^2}{2r} - k\frac{e^2}{r}$$

$$= -\frac{ke^2}{2r}$$

$$= -\frac{ke^2}{2a_0} \cdot \frac{1}{n^2}$$

シュレディンガー方程式 $E = -\frac{\hbar^2}{2m a_0^2}\frac{1}{n^2}$

$$\left(\frac{ke^2}{2a_0}\right) / \left(\frac{\hbar^2}{2m a_0^2}\right) = \frac{ke^2 m}{\hbar^2} a_0$$

$$= 1 \quad \left(a_0 = \frac{\hbar^2}{k m e^2}\right)$$

したがってこれらのエネルギー準位は等しい