

【前回 (第 7 回(6/16)) の Quiz の答え】

$$1. \quad \frac{d^2}{d\phi^2} \Phi(\phi) = -m_l^2 \Phi(\phi) \quad (\text{S4.d})$$

の一般解は、 $\Phi(\phi) = A \exp(im_l \phi) + B \exp(-im_l \phi)$ で表される (A, B は定数)。これが実際に(S4.d)の解であることを確かめなさい。

【答】この方程式は、極座標系の Schrödinger 方程式を変数分離して得られる、偏角 ϕ についての微分方程式です。解であることを確かめるには、方程式に代入してみればいいですね。(S4.d)に上記の一般解 $\Phi(\phi)$ を代入すると、

$$\begin{aligned} \frac{d}{dx} \Phi(\phi) &= im_l A \exp(im_l \phi) - im_l B \exp(-im_l \phi) \\ \frac{d^2}{dx^2} \Phi(\phi) &= i^2 m_l^2 A \exp(im_l \phi) + i^2 m_l^2 B \exp(-im_l \phi) = -m_l^2 A \exp(im_l \phi) - m_l^2 B \exp(-im_l \phi) \\ &= -m_l^2 (A \exp(im_l \phi) + B \exp(-im_l \phi)) = -m_l^2 \Phi(\phi) \end{aligned}$$

計算違いはありましたが、さすがに大体できていました。符号の間違いが若干ありました。 $i^2 = -1$ はもちろんですが、 $(-i)^2 = -1$ です。任意の実数 x について $x^2 \geq 0$ ですが、任意の(純)虚数 y について $y^2 < 0$ です。

【質問】「 r は原子核から電子までの距離か? $r=0$ が 1 点だとすると、原子核の内部ということになるので、原子核は電子も含むことになる。原子核からの距離だとすると、 $r=0$ は原子核 (表面) の球面になるので、1 点ではなくなるが…」

【回答】まず、この計算では原子核の大きさを考慮しておらず、原子核も電子も点電荷と仮定して計算しています。これは初等物理学の範囲では通常の見取りです。ですので、 $r=0$ は 1 点で、それは原子の (したがって原子核の) 中心になります。では、この仮定は正当なのでしょうか?

水素原子の場合、その大きさ (Bohr 半径) は $5.292 \times 10^{-11} \text{ m}$ (0.05292 nm)、原子核つまり陽子の大きさは $8.751 \times 10^{-16} \text{ m}$ (0.8751 fm、荷電半径) で、 10^5 (100,000) 倍違います。福岡ドームの直径が約 200m (グラウンド部の直径は約 100m) なので、これを水素原子とすると陽子は体長約 2mm のアリ程度です。福岡ドームのスケールで動径分布関数を考えるときに、マウンドの上にいるアリの中心と頭の先の違いを考える必要があるかどうか、ということです。ちなみにこのスケールでは、電子の大きさ (電磁的上限半径) は Bohr 半径に当たるドームの外周にいる大腸菌程度 (かそれ以下) です。

第 8 回(6/23)

第 4 章 原子の軌道と電子配置

4.2 水素原子の軌道

★前回プリントに載せ忘れた、軌道の図をいくつか載せておく。

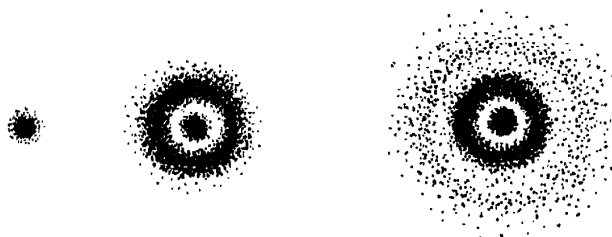


図 4.4 1s, 2s, 3s 関数の 2 乗の 3 次元空間分布

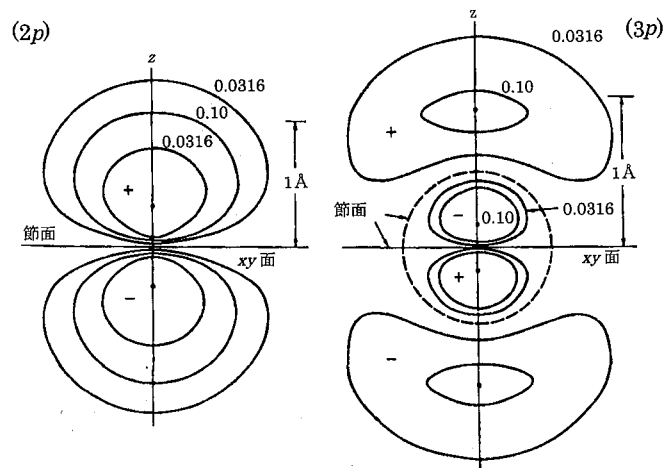
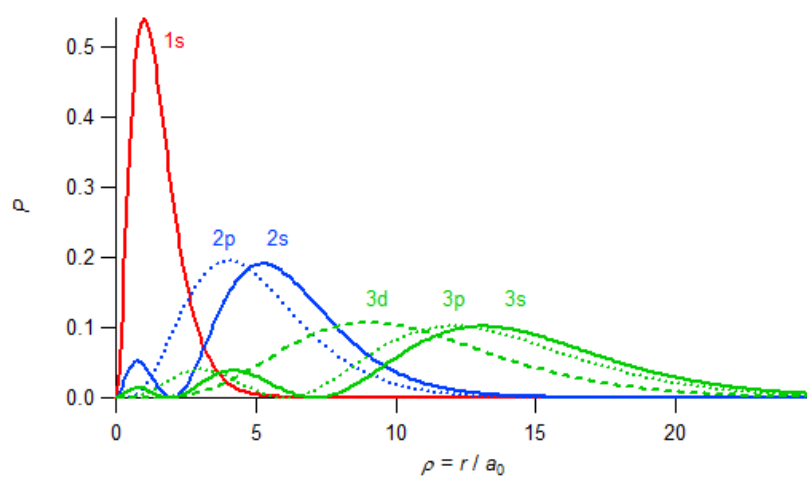


図 4.6 $2p_z$ 関数と $3p_z$ 関数を z 軸を含む面で切った断面における値 (Ogryzlo et al., *JCE*, Vol.40, 256, 1963.)



1s~3d 軌道の動径分布関数

$\text{Re}(Y_1^{-2})$	$\text{Re}(Y_2^{-1})$	$\text{Re}(Y_2^0)$	$\text{Re}(Y_2^0)$	$\text{Re}(Y_2^1)$	$\text{Re}(Y_2^2)$	$\text{Re}(Y_2^2)$

s、p、d、f 軌道の形

4.4 多電子原子

★教科書の図4.10と図4.11を混同しないように。図 4.10 は、原子番号が増えると核電荷が増加することにより、電子がより強く引きつけられてエネルギーが低下（安定化）することを示している。図 4.11 は、電子が2個以上になると、電子間の反発のために、同じ主量子数 n の軌道の縮退が解けて、方位量子数 l が異なる軌道間（例えば s 軌道と p 軌道）でエネルギーに差が生じることを示している。

図4.10と図4.11を合わせると、以下のような図になる。

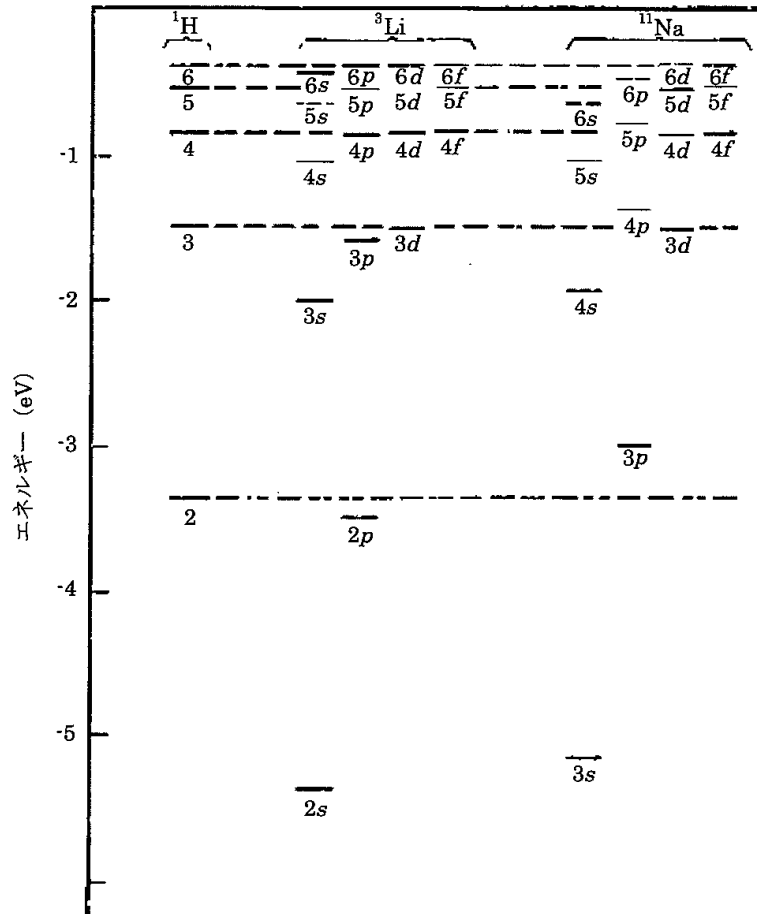


図 5.1 水素原子，リチウム原子，ナトリウム原子の原子軌道のエネルギー順位

★ $2s$ 軌道と $2p$ 軌道のエネルギーは Li においてすでにかなり違うことに注意。

【本日の Quiz】

- $2s$ 軌道では、1つの節面（節球面）で空間が2つに分割されている。 $3s$ 軌道ではいくつに分割されているか。
- 教科書の図 4.8 の $3d$ 軌道のうち、 $3d_{xz}$ 軌道と $3d_{yz}$ 軌道は、それぞれどんな節面を持ち、いくつに空間が分割されているか。
- 次の各原子について、スピンの向きも含めた電子配置を示せ。
(a) S (b) Cr

以上。