構造化学　No.3

理学部化学科　岡林潤
（スペクトル化学研究センター）
2016.10.26

【17】《水素原子》
水素原子の基底状態の波動関数は $\Psi_{1s} = \frac{1}{\sqrt{\pi}}\left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2} e^{-r/a_0}$ で表わされる.

1. 電子密度の最大の位置はどこか.
2. 電子が最もよく見いだされる核からの距離はいくらか.
3. 核からの電子の平均距離を求めよ.
4. 動径方向の Schrödinger 方程式を記せ.
5. エネルギー固有値を求めよ.

【18】《測定の不確かさ》
測定値の不確かさ

$$\Delta x = \sqrt{\sum_i P(x_i)(x_i - \langle x \rangle)^2}$$

は, 次の式で表わされることを示せ.

$$\Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2}$$

【19】　《球面調和関数》
球面調和関数 $Y^l_m(\theta, \phi)$ について, 次の式で表わされる定理が知られている.

$$\sum_{m=-l}^{l} Y_l^{m*}(\theta,\phi) Y_l^m(\theta,\phi) = \text{一定}$$

ここで, $Y_l^{m*}(\theta,\phi)$ は, $Y_l^m(\theta,\phi)$ の複素共役を表わす. $l = 0, 1, 2$ の場合に値を求めよ.

【20】　《動径方向》
水素原子の動径方向の波動関数 R_{nl} は、$n = l + 1$ のとき ($1s$, $2p$, $3d$) に非常に簡単な形

$$R_{nl}(r) = r^l e^{-ar}$$

となる. R_{nl} についての微分方程式 (p.80 (6.22)) に代入して r の係数を比較することにより, パラメータ a とエネルギー固有値を求めよ.

【21】《動径分布関数》
水素原子の $1s$, $2p$, $3d$ 状態 ($n = l + 1$) について, その動径分布関数が極大となる半径を算出せよ. ただし, 波動関数を $R_{nl}(r) = r^l e^{-ar}$ とする. これらが, Bohr の量子論から求めた円軌道の半径と等しいことを示せ.

【22】《水素原子の波動関数》
水素原子の s 状態の固有関数は,

$$\psi_{ns}(r) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} L_n(r) \exp\left(-\frac{r}{na_0}\right)$$

という形に表わされる. ここで, $L_n(r)$ は r に関する $n-1$ 次の多項式である. $L_n(r)$ の定義を用いずに,

1. 規格化条件から $\psi_{1s}(r)$ を決定せよ.
2. 規格化条件と, $\psi_{1s}(r)$ に直交するという条件を用いて $\psi_{2s}(r)$ を決定せよ.

【23】《角運動量演算子の固有値, 固有関数》
s 状態を表す関数（s 型関数）$\psi_s = \phi(r)$ は, 距離 $r = (x^2 + y^2 + z^2)^{1/2}$ に依存する関数である. また, p 状態を表す関数（p 型関数）は, $\psi_{p_x} = x\phi(r)$, $\psi_{p_y} = y\phi(r)$, $\psi_{p_z} = z\phi(r)$ と記述できる.

1. x, y, z とそれらの偏微分を用いて, 角運動量演算子 $\mathcal{L}_x$, $\mathcal{L}_y$, $\mathcal{L}_z$ をあらわせ.
2. s 型関数 $\phi(r)$ に $\mathcal{L}_z$ を左から作用させると, $\phi(r)$ が固有関数となり, 固有値が 0 となることを示せ.
3. s 型関数 $\phi(r)$ に $\mathcal{L}^2$ を左から作用させると, $\phi(r)$ が固有関数となり, 固有値が 0 となることを示せ. ただし, $\mathcal{L}^2 = \mathcal{L}_x^2 + \mathcal{L}_y^2 + \mathcal{L}_z^2$ である.
4. p 型関数 $\psi_{p_x} = x\phi(r)$ に $\mathcal{L}_z$ を左から作用させると, $i\hbar\psi_{p_y}$ となることを示せ.
   (このことから, ψ_{p_x} は $\mathcal{L}_z$ の固有関数とならないことがわかる.)
5. p 型関数 $\psi_{p_x} = x\phi(r)$ に $\mathcal{L}_x$ を左から作用させると, ψ_{p_x} が固有関数となることを示せ. また, 固有値を求めよ.
6. 関数 $(x \pm \mathrm{i}y)\phi(r)$ に $\mathcal{L}_z$ を左から作用させると, $(x \pm \mathrm{i}y)\phi(r)$ が固有関数となることを示せ. また, 固有値を求めよ.

○ 今回のレポートの締切は 11 月 16 日 (水) 14:55.
　○ 表紙は不要です. 氏名の記入を忘れずに.
　○ コメント, 感想, 質問等も記載してください.
　○ http://www.chem.s.u-tokyo.ac.jp/users/spectrum/lecture16.html に解答を載せます.
　（理学部化学科の web → スペクトルセンター web　→ 講義）