

[物理学標準]

水素型原子は、原子番号が  $Z$  の 1 電子原子またはイオンである。この水素型原子の波動関数について、以下の設問に答えよ。

- (1) 水素型原子軌道は三つの量子数によって定義される。三つの量子数の名前とそれぞれの物理的意味を説明せよ。
- (2)  $1s$  軌道の波動関数は以下で表される。ただし、 $r$  は原子中心からの距離、 $a_0$  はボーア半径である。

$$\phi_{1s} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left( \frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} e^{-\frac{Zr}{a_0}}$$

また、必要なら以下の定積分、極座標表示のラプラシアンを用いよ。

$$\int_0^{\infty} x^n e^{-ax} dx = \frac{n!}{a^{n+1}} \quad (a > 0, n \text{ は正の整数})$$

$$\Delta = \nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \left\{ \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} (\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta}) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right\}$$

- (a) 電子の存在確率が最大の値をもつ位置、および存在確率の大きさを計算せよ。
- (b)  $1s$  原子軌道の半径の期待値を求めよ。計算過程も示せ。
- (c)  $1s$  原子軌道で電子が見出される最大存在確率の半径  $r^*$  を求めよ。計算過程も示せ。
- (d)  $1s$  原子軌道の角運動量およびエネルギーを求めよ。ただし、プランク定数を  $h$ 、電子の電荷を  $-e$ 、質量を  $m$  とし、原子核の質量は電子の質量に比べ非常に大きいと考える。
- (3) 水素型原子でエネルギーの等しい二つの固有関数を考える。図 1 (i), (ii) はその固有関数のうち動径分布関数  $R(r)$  をそれぞれ示したものである。
- (e) (i) と (ii) に対応する軌道名を例のように答え、その根拠について説明せよ。  
例)  $1s, 2p, 3d, 4f$  など。

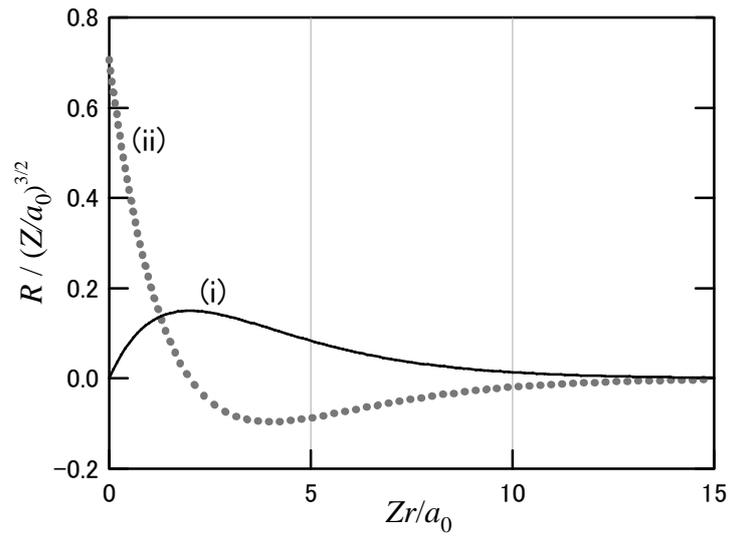


図1 水素型原子における  $R/(Z/a_0)^{3/2}$  と  $Zr/a_0$  の関係.

- (f) 水素型原子において、縮退した (i) と (ii) の軌道に大きさ  $E$  の電場を  $z$  方向に印加したとき、エネルギーの縮退がとける。この効果の名称を記せ。また、縮退がとけたときのエネルギー準位を図示せよ。