

[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。

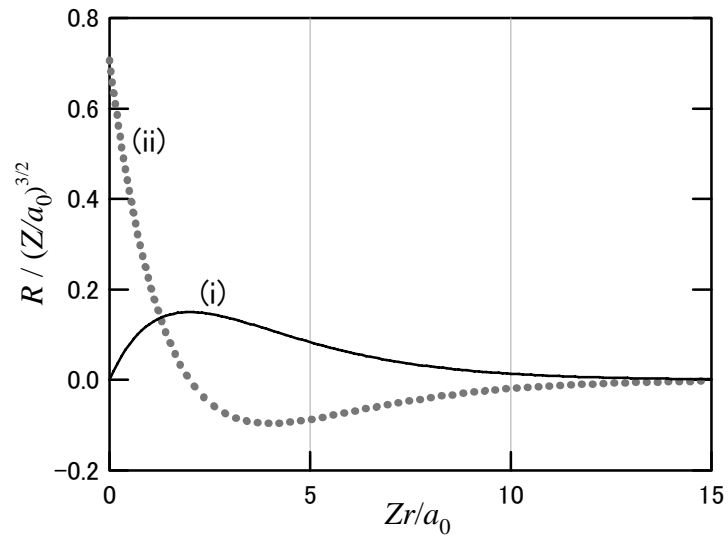


図1 水素型原子における $R/(Za_0)^{3/2}$ と Zr/a_0 の関係.

- (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。