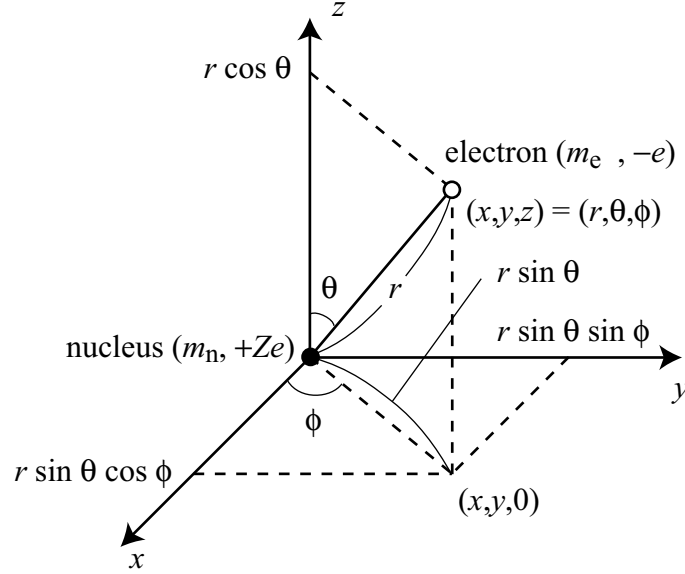


2 水素類似原子イオン

原子核 1 つ、電子 1 つからなる水素類似原子イオンは、水素原子と同様の取り扱いでエネルギー準位と波動関数を厳密に求めることができる。

2.1 水素類似原子イオン

He^+ , Li^{2+} 等は、水素原子と比較すると原子核の電荷が異なるだけで構成は同じであるため、水素類似原子（イオン）と呼ばれている。



原子核の質量を m_n 、電荷を $+Ze$ 、電子の質量を m_e 、電荷を $-e$ とする。

Schrödinger 方程式の極座標表示（ただし $\Psi(r, \theta, \phi)$ を単に Ψ と表記した）。

$$(2.1) \quad -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \Psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \Psi}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \phi^2} \right] - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \Psi = E\Psi$$

$$(2.2) \quad \mu = \frac{m_n m_e}{m_n + m_e}$$

水素原子の場合と同様の方法で厳密に解くことができる。

$$(2.3) \quad \Psi = \Psi(r, \theta, \phi) = R(r)Y(\theta, \phi)$$

角度部分の波動関数（水素原子の場合と同じ）

$$(2.4) \quad Y_{l,m}(\theta, \phi) = (-1)^{(m+|m|)/2} \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}} P_l^{|m|}(\cos \theta) e^{im\phi}$$

$$(2.5) \quad P_l^{|m|}(z) = (1-z^2)^{|m|/2} \frac{d^{|m|} P_l^0(z)}{dz^{|m|}}$$

$$(2.6) \quad P_l^0 = \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l}{dz^l} (z^2 - 1)^l$$

$$(2.7) \quad z = \cos \theta$$

動径部分の波動関数（水素原子の場合と係数が異なる）

$$(2.8) \quad R_{n,l}(r) = -\sqrt{\frac{4Z^3(n-l-1)!}{a_0^3 n^4 [(n+l)!]^3}} \rho^l e^{-\rho/2} L_{n+l}^{2l+1}(\rho)$$

$$(2.9) \quad L_k^s(\rho) = \frac{d^s}{d\rho^s} L_k(\rho)$$

$$(2.10) \quad L_k = e^\rho \frac{d^k}{d\rho^k} (\rho^k e^{-\rho})$$

$$(2.11) \quad \rho = \frac{2Zr}{na_0}$$

$$(2.12) \quad a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{\mu e^2}$$

エネルギー準位

$$(2.13) \quad E_n = -\frac{Z^2}{n^2} w_0$$

$$(2.14) \quad w_0 = \frac{\mu}{2\hbar^2} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2$$

2.2 原子単位 atomic unit (au)

次のように置いて得られる単位系を原子単位という。

$$(2.15) \quad m_e = 1$$

$$(2.16) \quad \hbar = 1$$

$$(2.17) \quad \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} = 1$$

長さの単位 bohr ($\mu \simeq m_e$ と見なした水素原子の Bohr 半径 a_0)

$$(2.18) \quad a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{m_e e^2} = 5.292 \times 10^{-11} \text{ m}$$

エネルギーの単位 hartree ($\mu \simeq m_e$ と見なした水素原子基底状態エネルギー w_0 の 2 倍)

$$(2.19) \quad \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 a_0} = \frac{\hbar^2}{m_e a_0^2} = 2|w_0| = 4.360 \times 10^{-18} \text{ J} = 27.21 \text{ eV}$$

水素類似イオンの核の電荷数が Z で $\mu \simeq m_e$ と見なしたとき、ハミルトニアン $\hat{H}$ と基底状態波動関数 Ψ_{1s} , 基底状態エネルギー W は au で次のように書ける。

$$(2.20) \quad \hat{H} = -\frac{1}{2}\nabla^2 - \frac{Z}{r}$$

$$(2.21) \quad \Psi_{1s} = \sqrt{\frac{Z^3}{\pi}} e^{-Zr}$$

$$(2.22) \quad W = -\frac{Z^2}{2}$$

演習問題

2-1. ポジトロニウムは電子と陽電子とからなる。陽電子の質量は電子と等しく、電荷の絶対値は電子と等しいが符号は反対である。

- (1) 換算質量を計算せよ。
- (2) Bohr 半径に相当する半径を計算せよ。
- (3) 基底状態エネルギーを計算せよ。
- (4) $n = 2$ の軌道から $n = 1$ の軌道への遷移に伴って放出される電磁波の波長を計算せよ。