波動関数の具体的な形

水素原子の波動関数の具体的な形を記しておく．テキスト p.100 の角度部分の (1.7) 式と動径部分の (1.13) 式を具体的に計算すればよい．

まず (1.7) 式の $Y(\theta,\phi)$ の方は，Legendre 関数を展開すればよい．$l=3$ までの具体的な関数形を以下に記す．($l=2$ までは，テキスト P.47 の (8.31~8.35) と同じである．Y は l および m によって関数形が変わるので，それを Y の添字として記されている．$Y_{2,0}$ は $l=2$, $m=0$，すなわち dz 軌道の角度部分の関数である)

$$Y_{0,0}=\sqrt{\frac{1}{4\pi}}$$

$$Y_{1,0}=\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta$$

$$Y_{1,\pm1}=\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta e^{\pm i\phi}$$

$$Y_{2,0}=\sqrt{\frac{5}{16\pi}}(3\cos^2\theta-1)$$

$$Y_{2,\pm1}=\sqrt{\frac{15}{8\pi}}\sin\theta\cos\theta e^{\pm i\phi}$$

$$Y_{2,\pm2}=\sqrt{\frac{15}{32\pi}}\sin^2\theta e^{\pm 2i\phi}$$

$$Y_{3,0}=\sqrt{\frac{7}{16\pi}}(5\cos^3\theta-3\cos\theta)$$

$$Y_{3,\pm1}=\sqrt{\frac{21}{64\pi}}\sin\theta(5\cos^2\theta-1)e^{\pm i\phi}$$

$$Y_{3,\pm2}=\sqrt{\frac{105}{32\pi}}\sin^2\theta\cos\theta e^{\pm 2i\phi}$$

$$Y_{3,\pm3}=\sqrt{\frac{35}{64\pi}}\sin^3\theta e^{\pm 3i\phi}$$

また，(1.33) 式の R も同様に，n, l に依存するので，$R_{n,l}(r)$ として表すとすると，$n=1\sim4$ の場合，次のようになる．ただし，$\rho=r/a_0$ である．

$$R_{1,0}=2\left(\frac{1}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}}e^{-\rho}$$

$$R_{2,0}=\frac{1}{2\sqrt{2}}\left(\frac{1}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}}(2-\rho)e^{-\rho/2}$$

$$R_{2,1}=\frac{1}{2\sqrt{6}}\left(\frac{1}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}}\rho e^{-\rho/2}$$

$$R_{3,0}=\frac{2}{81\sqrt{3}}\left(\frac{1}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}}(27-18\rho+2\rho^2)e^{-\rho/3}$$

$$R_{3,1}=\frac{4}{81\sqrt{6}}\left(\frac{1}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}}(6-\rho)\rho e^{-\rho/3}$$

$$R_{3,2}=\frac{4}{81\sqrt{30}}\left(\frac{1}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}}\rho^2 e^{-\rho/3}$$

$$R_{4,0}=\frac{1}{768}\left(\frac{1}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}}(192-144\rho+24\rho^2-\rho^3)e^{-\rho/4}$$

$$R_{4,1}=\frac{1}{256\sqrt{15}}\left(\frac{1}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}}(80-20\rho+\rho^2)\rho e^{-\rho/4}$$

$$R_{4,2}=\frac{1}{768\sqrt{5}}\left(\frac{1}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}}(12-\rho)\rho^2 e^{-\rho/4}$$

$$R_{4,3}=\frac{1}{768\sqrt{35}}\left(\frac{1}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}}\rho^3 e^{-\rho/4}$$

さて，まず動径関数 $R_{n,l}$ は $n-1$ 次の多項式を含んでいることがわかる．したがって，$R_{n,l}=0$ を満たす距離 $r(=a_0\rho)$ が $n-1$ 箇所あることになる．この r が 0 以外で $R_{n,l}=0$ となるところが動径方向の節である．l が 1 増えるごとに多項式が ρ でくくれるようになるので，節の数は減少し，とりうる最大の $l(l=n-1)$ のときに動径方向の節はなくなる．したがって，$R_{n,l}$ の節の数は $n-l-1$ 個ということになる．

次に，角度部分の関数と，化学結合でおなじみの p 軌道や d 軌道の関係はテキストの p.103 から 105 にかけて書いてある説明をよく読むこと．

また，波動関数 $\Psi_{n,m,l}=R_{n,l}Y_{l,m}$ の 2 乗が電子の存在確率密度に対応する．つまり，規格化条件は

$$\int_0^\infty dr\int_0^\pi d\theta\int_0^{2\pi}d\phi\quad r^2\sin\theta|\Psi_{n,m,l}|^2=1$$

となる．したがって，R や Y の規格化条件は，

$$\int_0^\infty r^2|R_{n,l}(r)|^2dr=1$$

$$\int_0^\pi\int_0^{2\pi}\sin\theta|Y_{l,m}(\theta,\phi)|^2d\theta d\phi=1$$

となる．さらに，$\rho=r/a_0$ なので，R の規格化条件を ρ で表せば，

$$\int_0^\infty a_0^3\rho^2|R_{n,l}(\rho)|^2d\rho=1$$

となることに注意すること．それぞれの関数について，$\int_0^\infty x^n e^{-\alpha x}dx=n!/\alpha^{n+1}$ などを用いて，規格化係数を確かめてみよ！