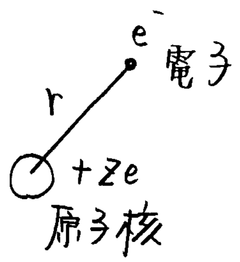
Department of Physics
Tohoku University
Sendai, Japan

4.2. "水素"原子の束縛状態



$$V(r) = -\frac{Ze^2}{r}$$

$$\psi(\mathbf{r}) = R_\ell(r)\, Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}})$$

$$\downarrow$$

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{d}{dr} + \frac{2\mu}{\hbar^2}\left(E + \frac{Ze^2}{r} - \frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2\mu r^2}\right)\right] R_\ell(r) = 0.$$

$$\rho \equiv \sqrt{\frac{8\mu|E|}{\hbar^2}}\; r$$

$$\downarrow$$

$$\left[\frac{8\mu|E|}{\hbar^2}\left(\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho}\frac{d}{d\rho} - \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2}\right) + \frac{2\mu}{\hbar^2}\underbrace{\left(\underset{-|E|}{\underset{\parallel}{E}} + \sqrt{\frac{8\mu|E|}{\hbar^2}}\cdot\frac{Ze^2}{\rho}\right)}_{=\ \frac{2\mu}{\hbar^2}|E|\left(\left(\sqrt{\frac{8\mu}{\hbar^2|E|}}\cdot Ze^2\right)\frac{1}{\rho} - 1\right)}\right] R_\ell(\rho) = 0$$

$$\left(\sqrt{\frac{8\mu}{\hbar^2|E|}}\cdot Ze^2\right) \equiv 4\lambda$$

$$\downarrow$$

$$\boxed{\left[\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho}\frac{d}{d\rho} - \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2} + \left(\frac{\lambda}{\rho} - \frac{1}{4}\right)\right] R_\ell(\rho) = 0}$$

$$\lambda = \frac{Ze^2}{\hbar}\sqrt{\frac{\mu}{2|E|}} = Z\cdot\frac{e^2}{\hbar c}\sqrt{\frac{\mu c^2}{2|E|}}$$

$$\frac{e^2}{\hbar c} = \alpha = \frac{1}{137}$$

・$\rho \to \infty$ での振るまい

$$\frac{d^2}{d\rho^2} R_\ell - \frac{1}{4} R_\ell = 0$$

$\Downarrow$ $R_\ell(\rho) \sim e^{-\frac{\rho}{2}}$

・$\rho \to 0$ での振るまい

$$\frac{d^2}{d\rho^2} R_\ell + \frac{2}{\rho}\frac{d}{d\rho} R_\ell - \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2} R_\ell = 0$$

$\Downarrow$ $R_\ell \sim \rho^\ell$

$$\left(R_\ell'' - \frac{2}{\rho} R_\ell' = \ell(\ell-1)\rho^{\ell-2} + 2\ell\rho^{\ell-2} = \ell(\ell+1)\rho^{\ell-2} \right)$$

$\Downarrow$

$$\boxed{R_\ell(\rho) = e^{-\frac{\rho}{2}} G(\rho) = e^{-\frac{\rho}{2}} \rho^\ell H(\rho)} \text{ とおいてみる。}$$

$\downarrow$

$$R_\ell' = -\frac{1}{2} e^{-\frac{\rho}{2}} G + e^{-\frac{\rho}{2}} G'$$

$$R_\ell'' = \frac{1}{4} e^{-\frac{\rho}{2}} G - e^{-\frac{\rho}{2}} G' + e^{-\frac{\rho}{2}} G''$$

$\Downarrow$

$$\left[\cancel{\frac{1}{4}} G - G' + G'' - \frac{1}{\rho} G + \frac{2}{\rho} G' - \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2} G + \left(\frac{\lambda}{\rho} - \cancel{\frac{1}{4}}\right) G \right] \times e^{-\frac{\rho}{2}} = 0$$

$\Downarrow$

$$G'' - \left(1 - \frac{2}{\rho}\right) G' + \left(\frac{\lambda - 1}{\rho} - \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2}\right) G = 0.$$

$$\sum_{k=0}^{\infty} a_k k(k-1)\rho^{k-2} = 2a_2 + 6a_3\rho + \cdots$$
$$\sum_{k=0}^{\infty} a_{k+1} \cdot k(k+1)\rho^{k-1} = 2a_2 + 6a_3\rho + \cdots$$

Department of Physics
Tohoku University
Sendai Japan

$$G(\rho) = \rho^{\ell} H(\rho)$$

$\downarrow$

$$G' = \ell \rho^{\ell-1} H + \rho^{\ell} H'$$
$$G'' = \ell(\ell-1)\rho^{\ell-2} H + 2\ell\rho^{\ell-1} H' + \rho^{\ell} H''$$

$\downarrow$

$$\cancel{\ell(\ell-1)\rho^{\ell-2}} H + 2\ell\rho^{\ell-1} H' + \rho^{\ell} H'' - \ell\rho^{\ell-1} H - \rho^{\ell} H'$$
$$+ 2\ell\cancel{\rho^{\ell-2}} H + 2\rho^{\ell-1} H' - \cancel{\ell(\ell+1)\rho^{\ell-2}} H$$
$$+ \frac{\lambda-1}{\rho}\rho^{\ell} H = 0$$

$$\boxed{H'' + \left(\frac{2\ell+2}{\rho} - 1\right) H' + \frac{\lambda-\ell-1}{\rho} H = 0}$$

$H(\rho) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k \rho^k$ と展開してみる

$\downarrow$

$$\sum_{k=0}^{\infty} a_k \left[k(k-1)\rho^{k-2} + k\left(\frac{2\ell+2}{\rho} - 1\right)\rho^{k-1} + (\lambda-\ell-1)\rho^{k-1} \right] = 0$$

$$\sum_{k=0}^{\infty} \Big(a_{k+1}(k+1)\cdot k \cdot \rho^{k-1} + (k+1)(2\ell+2)\rho^{k-1} a_{k+1}$$
$$- k a_k \rho^{k-1} + (\lambda-\ell-1)\rho^{k-1} a_k \Big) = 0$$

Department of Physics
Tohoku University
Sendai, Japan.

∴
$$\sum_{k=0}^{\infty} \rho^{k-1}\left[(k+1)(k+2l+2)a_{k+1}+(\lambda-l-1-k)a_k\right]=0$$

∴
$$\boxed{(k+1)(k+2l+2)a_{k+1}+(\lambda-l-1-k)a_k=0}$$

漸化式

(note) $$\frac{a_{k+1}}{a_k}=-\frac{\lambda-l-1-k}{(k+1)(k+2l+2)} \to \frac{1}{k}$$

∴ $a_k \sim \frac{1}{k!}$

∴

もし　kのシリーズが無限に続けば

$$H(\rho)=\sum_{k=0}^{\infty} a_k \rho^k \sim \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\rho^k}{k!} = e^\rho$$

この時

$$R_l(\rho) \sim \rho^l e^\rho \cdot e^{-\frac{\rho}{2}}$$
$$= \rho^l e^{\frac{\rho}{2}} \quad (\text{発散})$$

→ このようにならないためには和がどこかで止まる必要がある。

∴

$\boxed{\lambda = l+1+n_r}$　という条件が満たされれば

$$a_k = 0 \qquad (k \geq n_r+1)$$

Department of Physics
Tohoku University
Sendai, Japan

$n = n_r + l + 1$ とおくと

・$n \geq l + 1$
・n は整数
・エネルギーは

$$\lambda = \frac{Ze^2}{\hbar c}\sqrt{\frac{\mu c^2}{2|E|}} = n$$

$$E = -|E| = -\frac{(Z\alpha)^2}{2n^2}\cdot\mu c^2$$

$$\rho = \sqrt{\frac{8\mu}{\hbar^2}\cdot\frac{(Z\alpha)^2}{2n^2}\cdot\mu c^2}\ r = \frac{2\mu c\, Z\alpha}{n\hbar}\cdot r$$

$$= \frac{2Z}{na_0}r\ ;\ a_0 = \frac{\hbar}{\mu c\alpha}$$

(ボーア半径)

▨ スペクトル

エネルギーは n にしかよらない。
$\leftrightarrow$ 同じ n を持つ l, m の組は同じエネルギーを持つ。

・基底状態 ($n = 1$)

$$n_r = l = 0$$

$$E = -\frac{(Z\alpha)^2}{2}\cdot\mu c^2$$

$\mu c^2 = 0.51$ MeV, $Z = 1$ とすると

$$E = -\frac{1}{2}\cdot\left(\frac{1}{137}\right)^2\cdot 0.51 = 1.36\times10^{-5}\ \mathrm{MeV}$$

$$= 13.6\ \mathrm{eV}$$

波動関数 : $\underbrace{R_{10}}_{nl}(r) \propto e^{-\frac{\rho}{2}} = e^{-Zr/a_0}$

・第1励起状態 $(n=2)$

$$n_r + l + 1 = 2 \quad \rightarrow \quad n_r = 1,\ l = 0 \ ; \quad m = 0$$
$$n_r = 0,\ l = 1 \ ; \quad m = 0, \pm 1$$

4つの状態が同じエネルギーを持つ

$$E = -\frac{(Z\alpha)^2}{8} \cdot \mu c^2 = \frac{1}{4} \cdot E_{n=0}$$

波動関数

i) $n_r = 1,\ l = 0$

$$\frac{a_1}{a_0} = -\frac{1}{2} \quad \rightarrow \quad H(\rho) \propto \left(1 - \frac{\rho}{2}\right)$$

$$\Downarrow$$

$$\psi(\mathbf{r}) \propto \left(1 - \frac{Zr}{2a_0}\right) e^{-\frac{Zr}{2a_0}} \ Y_{00}(\hat{\mathbf{r}})$$

ii) $n_r = 0,\ l = 1 \quad \rightarrow \quad H(\rho) = \text{const.}$

$$\psi(\mathbf{r}) \propto r e^{-\frac{Zr}{2a_0}} \ Y_{1m}(\hat{\mathbf{r}})$$

・第2励起状態 $(n=3)$

$$n_r + l + 1 = 3 \rightarrow n_r = 2,\ l = 0, \quad m = 0$$
$$n_r = 1,\ l = 1, \quad m = 0, \pm 1$$
$$n_r = 0,\ l = 2, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2$$

9つの状態がエネルギー的に「縮退」

Department of Physics
Tohoku University
Sendai, Japan

$E=0$

$n=3$ —— $(\ell=2, m=0, \pm1, \pm2)$, $(\ell=1, m=0, \pm1)$, $(\ell=0, m=0)$
3D　3P　3S

$n=2$ —— $(\ell=1, m=0, \pm1)$ $(\ell=0, m=0)$
2P 状態,　2S

$n=1$ —— $(\ell=0, m=0)$
1S 状態

一般に，与えられた n に対し
$\ell = n-1, n-2, n-3, \cdots, 0$
各 ℓ に対し $-\ell \le m \le \ell$
の状態がエネルギー的に縮退

波動関数は $H(\rho) = L_{n-\ell-1}^{(2\ell+1)}(\rho)$
ラゲール陪多項式

$$L_n^{(\alpha)}(\rho) = \sum_{m=0}^{n} \binom{n+\alpha}{n-m} \frac{(-\rho)^m}{m!}$$