

## 波動関数の角度依存性

$$\Theta_{0,0} = \frac{1}{\sqrt{2}} \tag{1}$$

$$\Theta_{1,0} = \sqrt{\frac{3}{2}} \cos \theta \qquad \Theta_{1,\pm 1} = \sqrt{\frac{3}{4}} \sin \theta \tag{2}$$

$$\Theta_{2,0} = \sqrt{\frac{5}{8}} (3 \cos^2 \theta - 1) \qquad \Theta_{2,\pm 1} = \sqrt{\frac{15}{4}} \sin \theta \cos \theta \qquad \Theta_{2,\pm 2} = \sqrt{\frac{15}{16}} \sin^2 \theta \tag{3}$$

$$\Phi_0 = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \tag{4}$$

$$\Phi_{\pm 1} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{\pm i\phi} \tag{5}$$

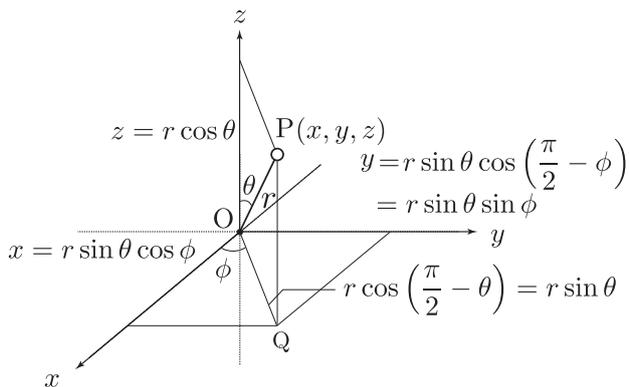
$$\Phi_{\pm 2} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{\pm 2i\phi} \tag{6}$$

## 直角座標と極座標

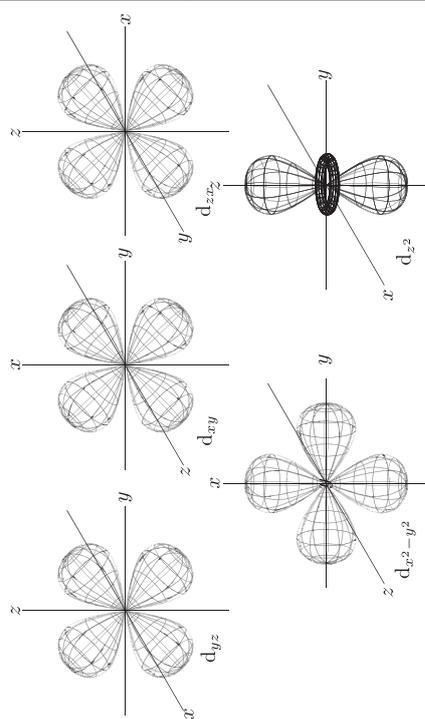
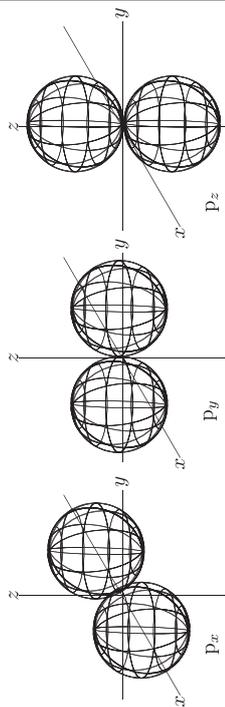
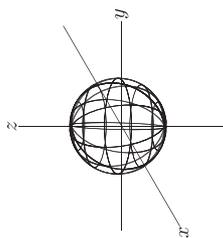
$$x = r \sin \theta \cos \phi \tag{7}$$

$$y = r \sin \theta \sin \phi \tag{8}$$

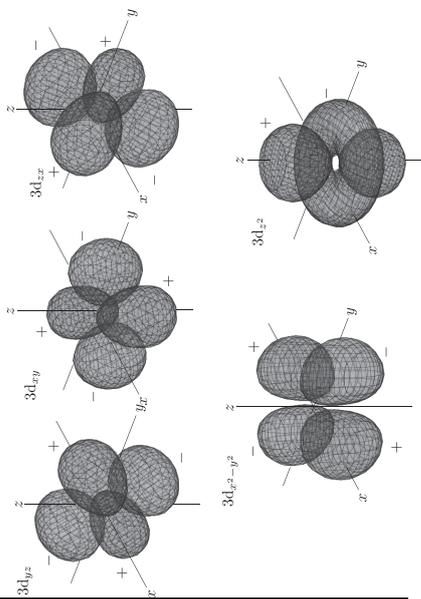
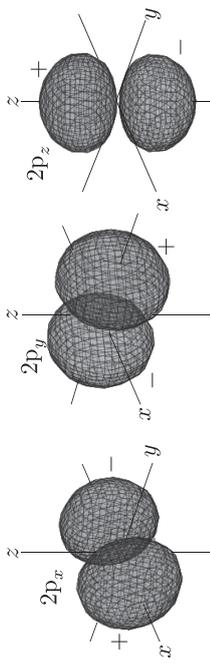
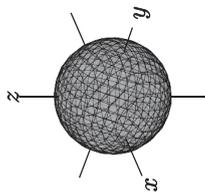
$$z = r \cos \theta \tag{9}$$



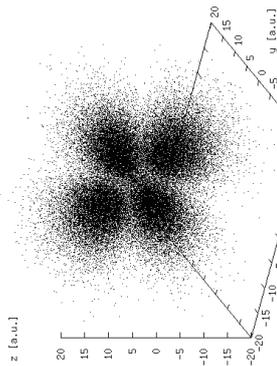
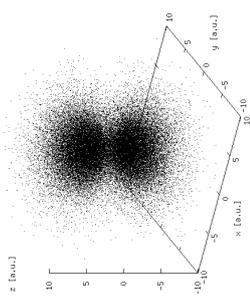
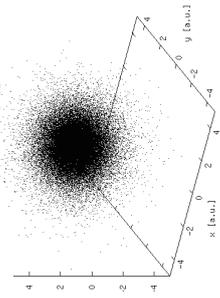
# 極座標表示



# 等高面



# 電子雲



波動関数の二乗の等高面を電子雲とよぶ場合もあるが、電子を測定した結果を次々と記録のように描かれたものを電子雲という場合もある。

3.  $0 \leq \theta \leq \pi$  で  $Y_{pz} = \cos \theta$  を極座標図として表せ ( $Y$  が正の値は青でプロットし,  $Y$  が負の値は赤でプロットするなど波動関数の正負を色で区別せよ)。ただし, データは, 次表の値を用いてよい。なお, ここで  $Y_{pz}$  の定数項などは無視した。

$\theta$	0	10	20	30	40	50	60	70	80	90
$Y_{pz}$	1.00	0.98	0.94	0.87	0.77	0.64	0.5	0.34	0.17	0.00
$\theta$		100	110	120	130	140	150	160	170	180
$Y_{pz}$		-0.17	-0.34	-0.5	-0.64	-0.77	-0.87	-0.94	-0.98	-1.00

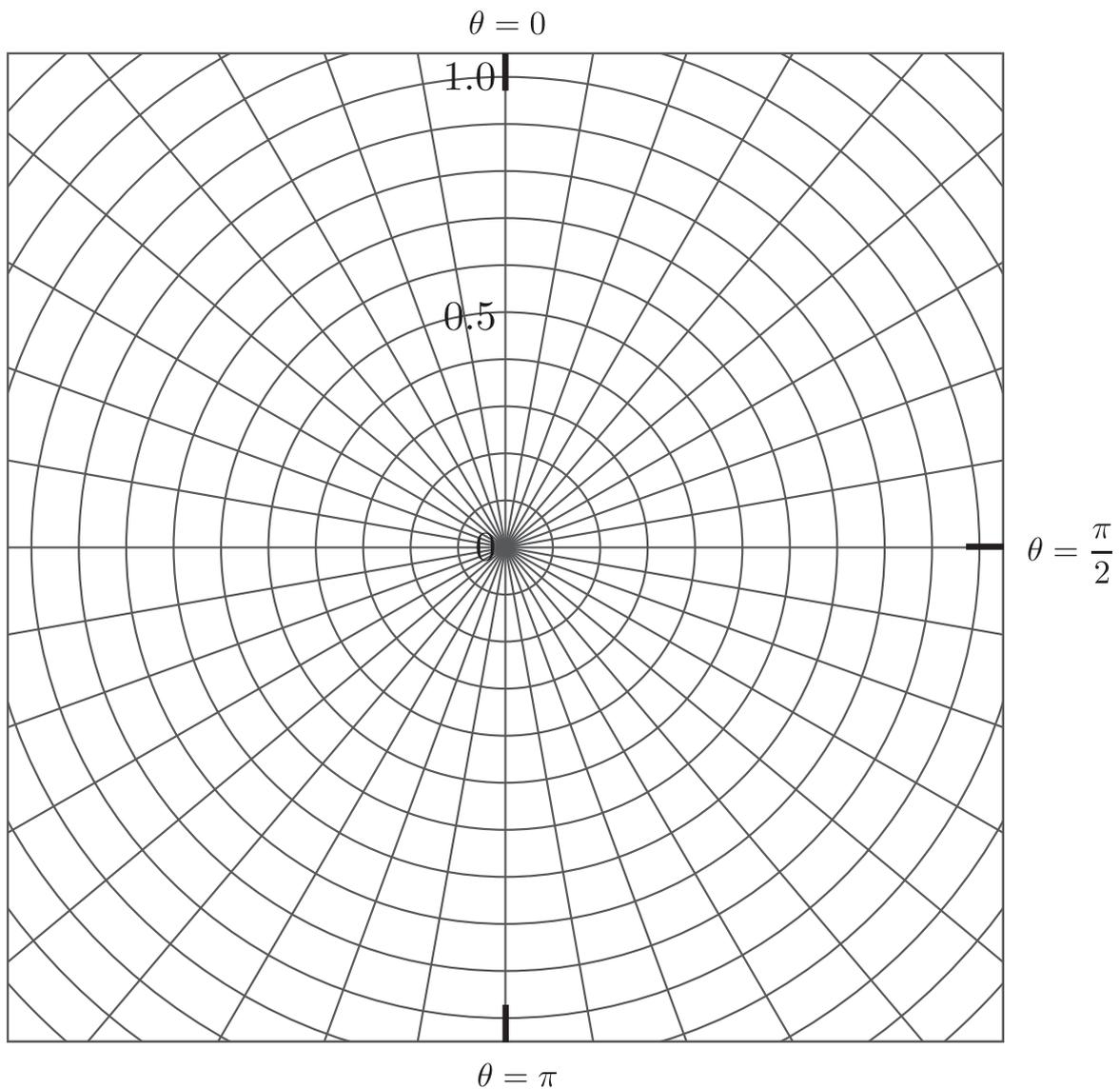


図 1: 極座標図:  $Y_{pz} = \cos \theta$  のプロット

4.  $0 \leq \theta \leq \pi$  で  $Y_{d_{z_2}} = 3 \cos^2 \theta - 1$  を極座標図として表せ (Y が正の値は青でプロットし, Y が負の値は赤でプロットするなど波動関数の正負を色で区別せよ)。ただし, データは, 次表の値を用いてよい。なお, ここで  $Y_{d_{z_2}}$  の定数項などは無視した。

$\theta$	0	10	20	30	40	50	60	70	80	90
$Y_{d_{z_2}}$	2.00	1.91	1.65	1.25	0.76	0.24	-0.25	-0.65	-0.91	-1.00
$\theta$		100	110	120	130	140	150	160	170	180
$Y_{d_{z_2}}$		-0.91	-0.65	-0.25	0.24	0.76	1.25	1.65	1.91	2.00

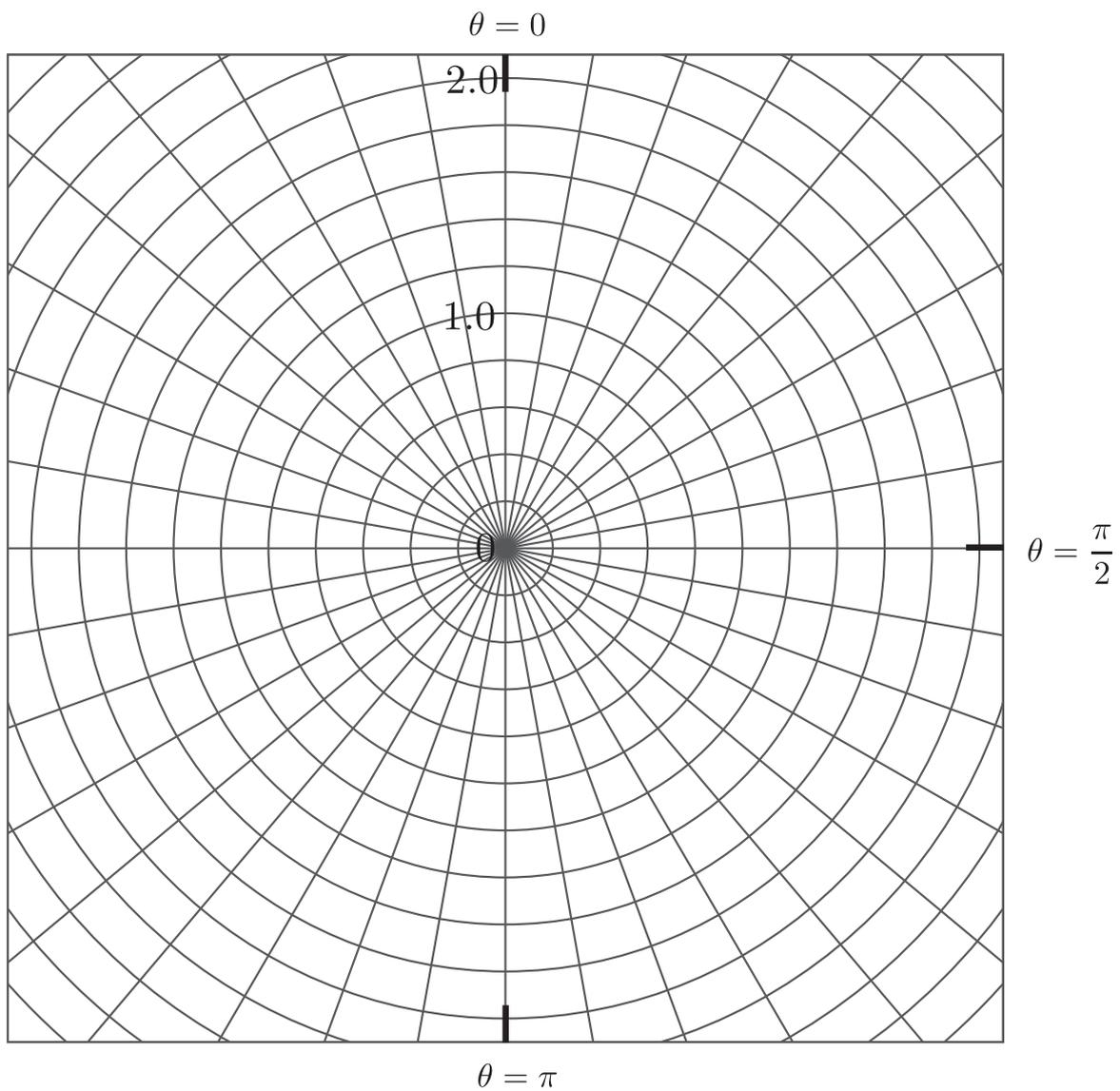


図 2: 極座標図:  $Y_{d_{z_2}} = 3 \cos^2 \theta - 1$  のプロット



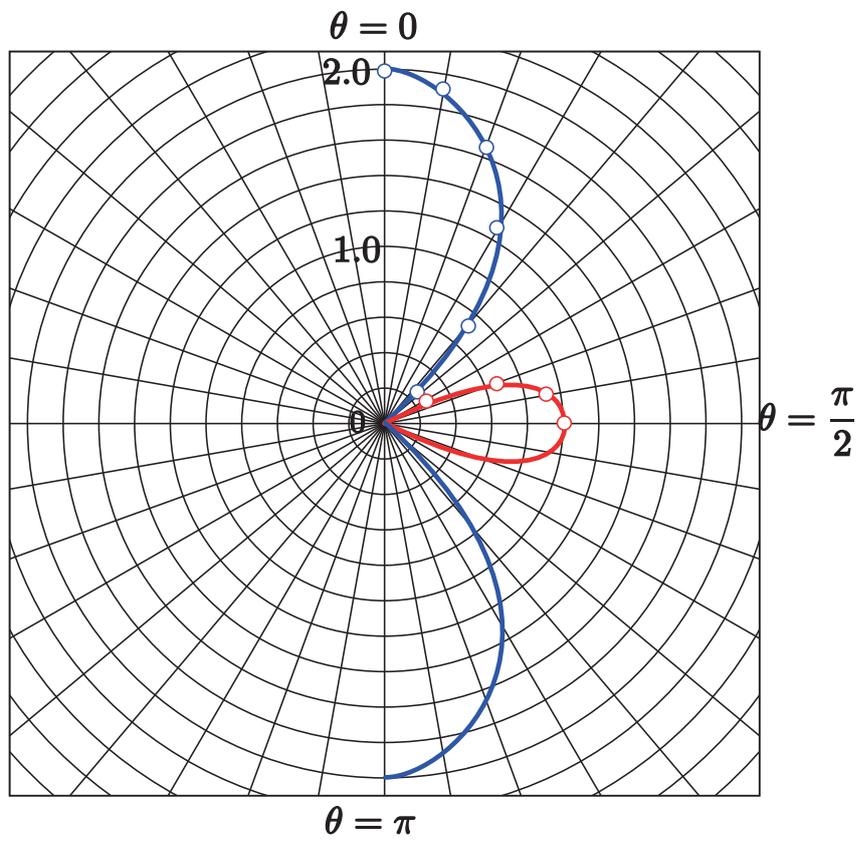
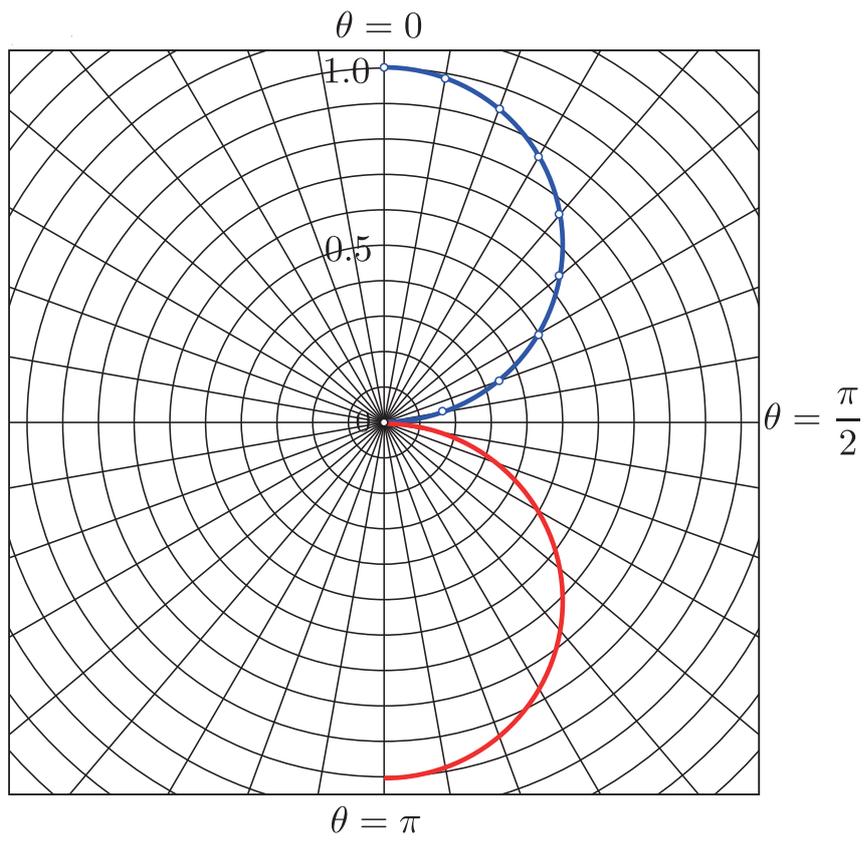


図 3: 極座標図 :  $Y_{p_z}$  と  $Y_{d_{z_2}}$  のプロット