注意 「量子力学 I」では，原子核と電子を基本粒子として扱うから，これより小さな基本粒子であるクォークやレプトンに関する知識は必要ないが，知っておいても損はない。

原子の構造

原子は**原子核**が中心に存在し，その周りに電子が存在する。**電子**は原子核に比べて圧倒的に軽く，陽子，中性子の質量の 1/1840 しかない。また，電子は負の電荷を持つ。原子核は電子と同じ荷数分の正電荷を有し，原子全体としては電気的に中性である。原子核は更に**陽子**と**中性子**から構成されており，原子核の正電荷を担うのは陽子であり，中性子は電荷を持たない。陽子と中性子の質量はほぼ等しい。

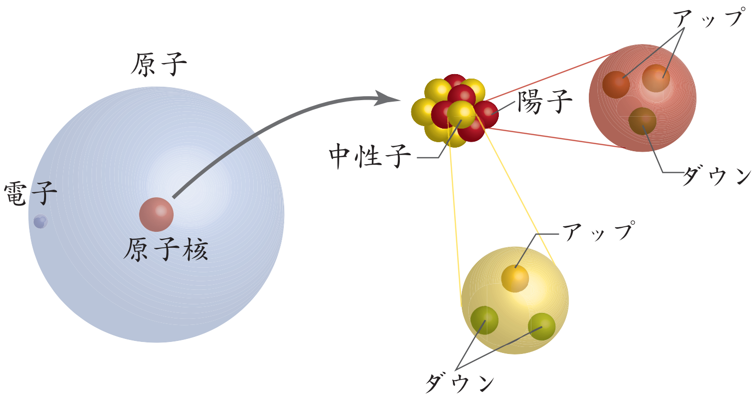

図 1　原子の構造：原子は原子核と電子から構成されており，原子核はさらに中性子と陽子から構成されている。電子は素粒子であり，（現在の標準理論では）それ以上分割することのできない基本粒子と考えられているが，陽子と中性子は素粒子ではなく，それぞれアップ，ダウンと呼ばれるクォークという素粒子から構成されていると考えられている。電子はレプトンと呼ばれる素粒子の 1 種類であると考えられている。

表 1　標準理論による物質の素粒子。質量の違いによって「世代」と呼ばれる分類がされる。

	第 1 世代	第 2 世代	第 3 世代
クオーク	アップ	チャーム	トップ
	ダウン	ストレンジ	ボトム
レプトン	電子ニュートリノ	ミューニュートリノ	タウニュートリノ
	電子	ミュー	タウ

陽子と中性子は更に小さな基本粒子である**アップ**と**ダウン**と呼ばれる**クォーク**から構成されている。陽子はアップが 2 個とダウンが 1 個で構成され，中性子はアップが 1 個とダウンが 2 個で構成されている。クォークは**素粒子**であり，これ以上分割できないものと考えられている。また，アップは $+2/3$ の電荷を有し，ダウンは $-1/3$ の電荷を有している。これから，陽子の電荷は $(+2/3) \times 2 + (-1/3) = +1$ と計算され，中性子の電荷は $(+2/3) + (-1/3)\times = 0$ と計算される。一方，電子はもうそれ以上分割できない素粒子である。しかし，陽子や中性子を構成しているクォークの仲間ではなく，**レプトン**と呼ばれる素粒子の仲間である。

第9章 水素原子

95 頁

9.2 Schrödinger 方程式をたてる

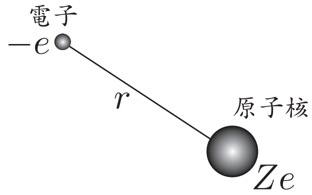

図 9.2　水素類似原子

$\boxed{\text{直交座標}}$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_\mathrm{e}}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)+U(x,y,z)\right]\Psi=E\Psi$$

$\boxed{\text{極座標}}$（詳解 84〜92 頁）

$$-\frac{\hbar^2}{2m_\mathrm{e}}\frac{1}{r^2\sin\theta}\left[\sin\theta\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\Psi}{\partial r}\right)+\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\Psi}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial^2\Psi}{\partial\phi^2}\right]+U(r)\Psi=E\Psi \tag{9.1}$$

↑このままでは解けないから，変数分離を仮定する。

96 頁

9.3 Schrödinger 方程式を解く

変数分離

$$\Psi=R(r)\cdot\Theta(\theta)\cdot\Phi(\phi) \tag{9.2}$$

↑これを (9.1) 式に代入して整理すると，↓を得る。

$$\underbrace{\left[\frac{\sin^2\theta}{R}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\left(r^2\frac{\mathrm{d}R}{\mathrm{d}r}\right)\right]}_{[\,\theta,r\,]}+\underbrace{\left[\frac{\sin\theta}{\Theta}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\theta}\left(\sin\theta\frac{\mathrm{d}\Theta}{\mathrm{d}\theta}\right)\right]}_{[\,\theta\,]}+\underbrace{\left[\frac{2m_\mathrm{e}r^2\sin^2\theta}{\hbar^2}\{E-U(r)\}\right]}_{[\,r,\theta\,]}=-\underbrace{\left[\frac{1}{\Phi}\frac{\mathrm{d}^2\Phi}{\mathrm{d}\phi^2}\right]}_{[\,\phi\,]} \tag{9.3}$$

$\boxed{\Phi(\phi)}$

$$-\frac{1}{\Phi}\frac{\mathrm{d}^2\Phi}{\mathrm{d}\phi^2}=\text{定数}=m^2$$

←既に（先週）解いた

$$\Phi_m(\phi)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\phi}\qquad(m=0,\pm1,\pm2,\dots) \tag{9.4}$$

(9.3) 式の左辺 $=m^2$ とおいて整理すると，↓を得る。

97 頁

$$\underbrace{\frac{1}{\Theta\sin\theta}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\theta}\left(\sin\theta\frac{\mathrm{d}\Theta}{\mathrm{d}\theta}\right)-\frac{m^2}{\sin^2\theta}}_{[\,\theta\,]}=\underbrace{-\frac{1}{R}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\left(r^2\frac{\mathrm{d}R}{\mathrm{d}r}\right)-\frac{2m_\mathrm{e}r^2}{\hbar^2}\{E-U(r)\}}_{[\,r\,]} \tag{9.8}$$

$\boxed{\Theta(\theta)}$

$$\frac{1}{\Theta\sin\theta}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\theta}\left(\sin\theta\frac{\mathrm{d}\Theta}{\mathrm{d}\theta}\right)-\frac{m^2}{\sin^2\theta}=\text{定数}=-\ell(\ell+1) \tag{9.9}$$

↑解けないことはないが，相当難しい。解けなくてもがっかりしなくて良い。

（解法は，詳解 57〜66 頁）

$$\Theta_{\ell,m}(\theta)=\sqrt{\frac{2\ell+1}{2}\frac{(\ell-|m|)!}{(\ell+|m|)!}}\sin^{|m|}\theta\frac{\mathrm{d}^{|m|}}{(\mathrm{d}\cos\theta)^{|m|}}P_\ell(\cos\theta) \tag{9.10}$$

ただし，$\dfrac{\mathrm{d}^{|m|}}{(\mathrm{d}\cos\theta)^{|m|}}$ は「$\cos\theta$ で $|m|$ 回微分せよ」という意味。

大きな $\sqrt{\ }$ は，ただの規格化定数

$P_\ell(\cos\theta)$ は Legendre の陪多項式で，次式で表される。

$$P_\ell(\cos\theta)=\frac{1}{2^\ell\ell!}\frac{\mathrm{d}^\ell}{(\mathrm{d}\cos\theta)^\ell}\left(\cos^2\theta-1\right)^\ell \tag{9.11}$$

ただし，$m=0,\pm1,\pm2,\dots\pm\ell$ ：微分方程式の「微分の回数」に関する制限より。
詳しくは，詳解 61 頁の上から 3 行

$\boxed{R(r)}$

$$-\frac{1}{R}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\left(r^2\frac{\mathrm{d}R}{\mathrm{d}r}\right)-\frac{2m_\mathrm{e}r^2}{\hbar^2}\{E-U(r)\}=\text{定数}=-\ell(\ell+1) \tag{9.16}$$

↑これも，解けないことはないが，相当難しい。解けなくてもがっかりしなくて良い。

（解法は，詳解 121〜134 頁）

$$U(r)=-\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{Ze^2}{r}\text{（クーロンポテンシャル）である場合,} \tag{9.18}$$

98 頁

$$E_n=-\frac{Z^2em_\mathrm{e}e^4}{8\epsilon_0^2h^2n^2}\text{とおいたときに限って，次の解を持つ。} \tag{9.19}$$

$$R_{n,\ell}(\rho)=-\sqrt{\frac{4(n-\ell-1)!}{n^4[(n+\ell)!]^3}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}\rho^\ell e^{-\rho/2}L_{n+\ell}^{2\ell+1}(\rho) \tag{9.20}$$

$$\rho=\frac{2Z}{na_0}r,\qquad a_0=\frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{m_e e^2} \tag{9.21}$$

ただし，$n=1,2,3,\dots$ ：波動関数が ∞ に発散しないために必要な条件

$\ell=0,1,2,\dots n-1$

大きな $\sqrt{\ }$ は，ただの規格化定数

規格化定数に負号をつけたのは，波動関数の値を正にするため（本質的な箇所ではない）

$L_{n+\ell}^{2\ell+1}(\rho)$ は Laguerre（ラゲール）の陪多項式で，次式で表される。

$$L_\alpha^\beta(\rho)=\frac{\mathrm{d}^\beta}{\mathrm{d}\rho^\beta}L_\alpha(\rho)$$

$$L_\alpha(\rho)=e^\rho\frac{\mathrm{d}^\alpha}{\mathrm{d}\rho^\alpha}\left(\rho^\alpha e^{-\rho}\right) \tag{9.22}$$

9.4 まとめ

$$
\begin{aligned}
\Psi &= \underbrace{-\sqrt{\frac{4\,(n-\ell-1)!}{n^4\left[(n+\ell)!\right]^3}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}}\rho^{\ell}e^{-\frac{\rho}{2}}L_{n+\ell}^{2\ell+1}(\rho)}_{R_{n,\ell}(\rho)} \\
&\quad\times\underbrace{\sqrt{\frac{2\ell+1}{2}\frac{(\ell-|m|)!}{(\ell+|m|)!}}\sin^{|m|}\theta\frac{\mathrm{d}^{|m|}}{(\mathrm{d}\cos\theta)^{|m|}}P_{\ell}(\cos\theta)}_{\Theta_{\ell,m}(\theta)}\cdot\underbrace{\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\phi}}_{\Phi_m(\phi)} \qquad (9.23)
\end{aligned}
$$

$$
E_n = -\frac{Z^2 m_{\mathrm{e}} e^4}{8\epsilon_0^2 h^2 n^2}
$$

もしくは

$$
E_n = -\frac{Z^2 e^2}{8\pi\epsilon_0 a_0 n^2} \qquad \text{ただし，} a_0 = \frac{\epsilon_0 h^2}{\pi m_{\mathrm{e}} e^2} \text{：Bohr 半径} = 0.0529\ \mathrm{nm} \qquad (9.24)
$$

$$
\begin{cases}
\text{主量子数} & n = 1, 2, 3, \ldots \\
\text{方位量子数} & \ell = 0, 1, 2, \ldots, n-1 \\
\text{磁気量子数} & m = -\ell, -\ell+1, \ldots, \ell-1, \ell
\end{cases} \qquad (9.25)
$$

- **θ に関する微分方程式と r に関する微分方程式は，自力で解けなくても落胆する必要はない。それよりも，$n = 1, 2, 3$ の場合について $\Theta_{\ell,m}(\theta)$ と $R_{n,\ell}(r)$ が具体的にどのような形になるのかを確認するのが重要である。**

- ただし，高校で習う程度の数学 + ちょっとした微分公式で解けないこともない。しかし，簡単な作業ではない。興味があれば，「詳解」を参考にせよ。