

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

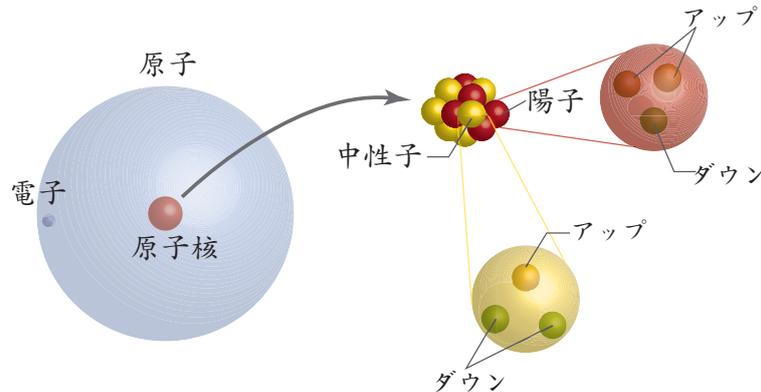


図 1 原子の構造：原子は原子核と電子から構成されており、原子核はさらに中性子と陽子から構成されている。電子は素粒子であり、(現在の標準理論では) それ以上分割することのできない基本粒子と考えられているが、陽子と中性子は素粒子ではなく、それぞれアップ、ダウンと呼ばれるクォークという素粒子から構成されていると考えられている。電子はレプトンと呼ばれる素粒子の 1 種類であると考えられている。

ては電的に中性である。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。

水素原子

0.1 Schrödinger 方程式をたてる

直交座標

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_e} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}} \right] \Psi = E\Psi$$

極座標

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

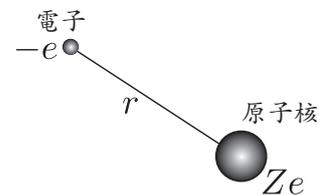


図 2 水素類似原子

(1)

0.2 Schrödinger 方程式を解く

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

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

もしくは

$$E_n = -\frac{Z^2 e^2}{8\pi\epsilon_0 a_0 n^2} \quad \text{ただし, } a_0 = \frac{\epsilon_0 h^2}{\pi m_e e^2} : \text{Bohr 半径} = 0.0529 \text{ nm} \quad (3)$$

$$\begin{cases} \text{主量子数} & n = 1, 2, 3, \dots \\ \text{方位量子数} & \ell = 0, 1, 2, \dots, n-1 \\ \text{磁気量子数} & m = -\ell, -\ell+1, \dots, \ell-1, \ell \end{cases} \quad (4)$$

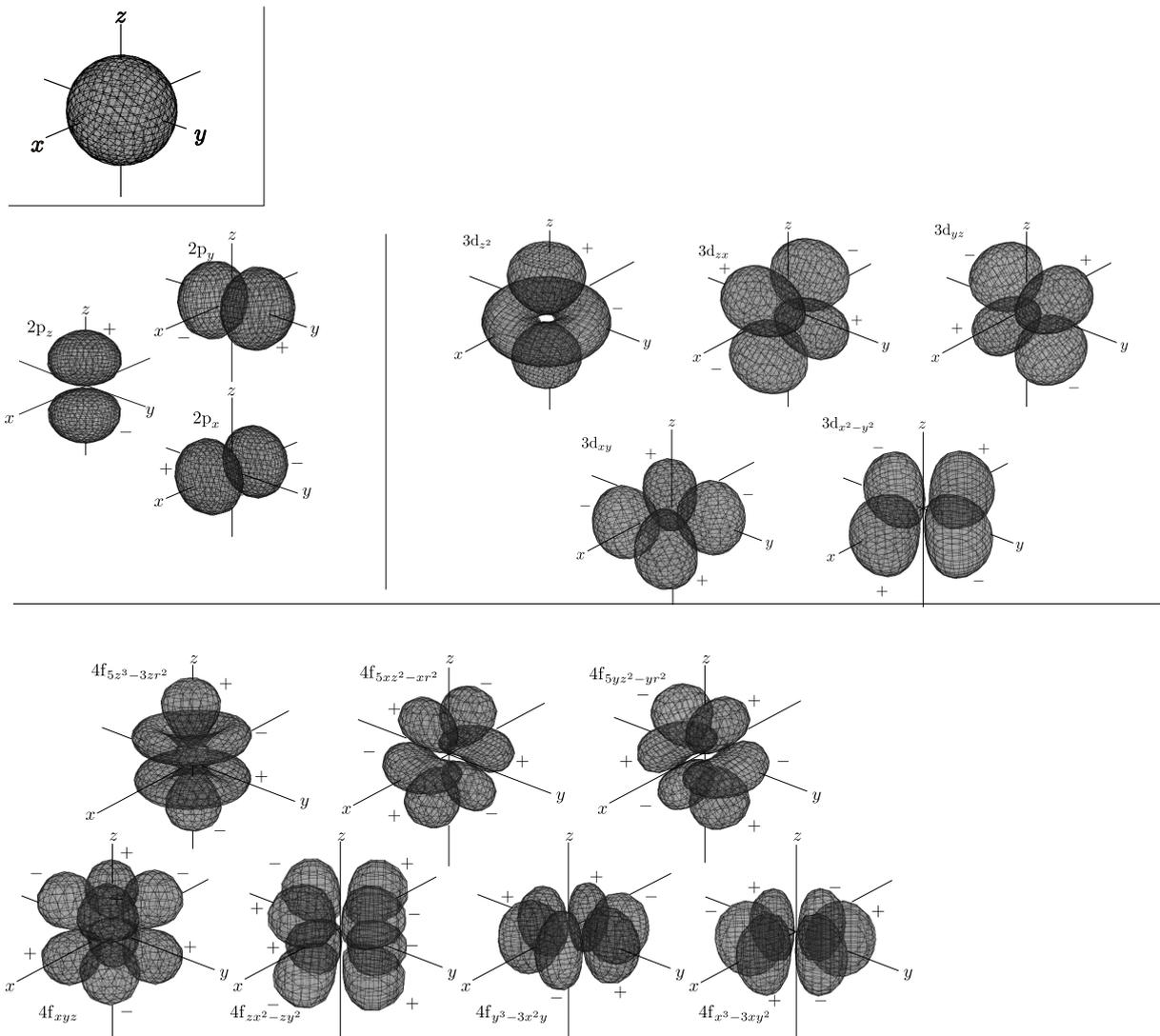


図3 波動関数の等高面