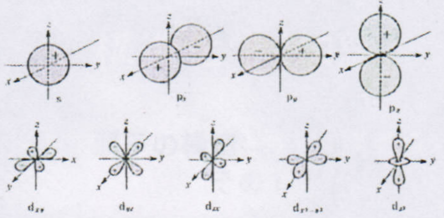
3.1. 水素（様）原子のSchrödinger方程式

- 球面調和関数とs,p,d関数



電子の存在確率の角度依存性
（各方向に対するYの値をその方向のベクトルの
長さにとり、ベクトルの先端が描く図形として表現）

大野公一　量子物理化学

3.1. 水素（様）原子のSchrödinger方程式

- 動径成分 Rについて

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{\partial^2 R}{\partial r^2}+\frac{2}{r}\frac{\partial R}{\partial r}\right)+V_{eff}\,R=E\,R$$

Laguerre（ラゲール）の微分方程式

ただし $V_{eff}=-\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Ze^2}{r}+\frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2}$

この式が一価・有限・連続な解$R(r)$を持つためには

$$\Longrightarrow\ E=-\frac{\mu Z^2 e^4}{8\varepsilon_0^2 h^2}\frac{1}{n^2}$$

ただし $n=l+1,l+2,l+3,\ldots$ ：主量子数（エネルギー準位を定める量子数）

（lを決めるとm, nが決まる）

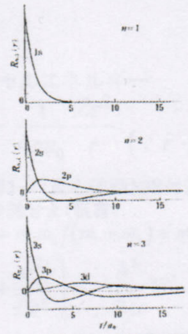
$$\Longrightarrow\ R(r)\rightarrow R_{n,l}(r)$$

と、n, lにより規定される（Laguerre（ラゲール）の陪多項式）

3.1. 水素（様）原子のSchrödinger方程式

- 動径成分 Rについて

軌道名	$R_{n,l}$　　$\rho=\frac{2Zr}{na_0}$
1s	$R_{1,0}=2\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}e^{-\rho/2}$
2s	$R_{2,0}=\frac{1}{2\sqrt{2}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}(2-\rho)e^{-\rho/2}$
2p	$R_{2,1}=\frac{1}{2\sqrt{6}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}\rho e^{-\rho/2}$
3s	$R_{3,0}=\frac{1}{9\sqrt{3}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}(6-6\rho+\rho^2)e^{-\rho/2}$
3p	$R_{3,1}=\frac{1}{9\sqrt{6}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}(4\rho-\rho^2)e^{-\rho/2}$
3d	$R_{3,2}=\frac{1}{9\sqrt{30}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}\rho^2 e^{-\rho/2}$



大野公一　量子物理化学

3.2. 量子数

- （これまで）ある l について　　（これから）ある n について

$n=l+1,l+2,l+3,\ldots$　$\Longrightarrow$　n

l　　　$l=n-1,n-2,\ldots,0$

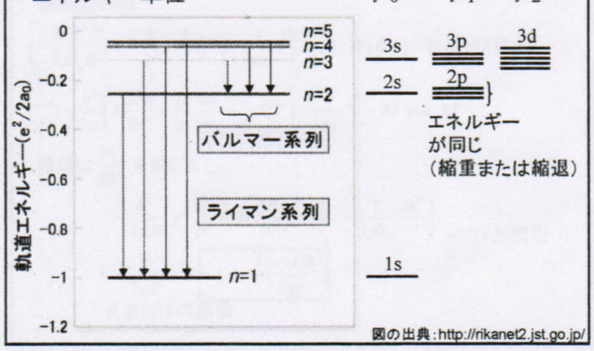
$m=l,l-1,l-2,\ldots,-l$　　　$m=l,l-1,l-2,\ldots,-l$

	名前	取れる値	何を示す尺度か
n	主量子数	1, 2, 3, ・・・	エネルギー
l	方位量子数	0, 1, ・・・, n−1	角運動量の大きさ
m	磁気量子数	−l, −l+1, ・・・, l−1, l	角運動量のZ区分

図の出典：http://rikanet2.jst.go.jp/

3.2. 量子数

- エネルギー準位



図の出典：http://rikanet2.jst.go.jp/