量子力学〜原子について〜

芝浦工業大学　数理科学研究会
富岡大貴

平成 30 年 11 月 4 日

研究背景

元々, 物理に興味があり, 大学に入り物理数学を学んだ. それを深く研究出来る題材として量子力学があったのでこのテーマにした. 今回このテーマを研究するにあたり, 量子力学の中から原子について研究していこうと思う.

1　原子の構造

電子は負の電荷を持っており, 原子核の持つ正電荷に引き寄せられることで, 原子核の周囲を回っている. その+電荷はどのような形をしているかについて, 原子核と電子がそのまわりを回っているようなモデルがある. 今回は水素原子に焦点を置いてみていこう.

2　水素原子と波動方程式

水素原子には中心に電荷$+e$ の原子核があり電子との間のクーロン力は $U(r)$=$-\frac{e^2}{r}$ である.(r は原子核と電子の間の距離) このとき原子核を原点として波動方程式を書くと次のようになる.

$$-\frac{h^2}{2m}\Delta\varphi + U(r)\varphi = E\varphi \qquad U(r) = -\frac{e^2}{r}$$

さらにこのときの極座標は

$$x = r\sin\theta\cos\phi$$
$$y = r\sin\theta\sin\phi$$
$$z = r\cos\theta$$

であり

$$\Delta^2 = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2}\Lambda$$
$$\Lambda = -\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta} - \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}$$

となる.

2.1　変数分離法

波動関数 (r,θ,ϕ) を r に関する部分 $R(r)$ と (θ,ϕ) に関する部分 $Y(\theta,\phi)$ の積とおく. さらに θ だけの関数 $\Theta(\theta)$ と ϕ だけの関数 $\Phi(\phi)$ に分離すると $R(r),\Theta(\theta),\Phi(\phi)$ それぞれに関する方程式は

$$-\frac{h^2}{2m}\left(\frac{d^2R}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{dR}{dr}\right) + \left(U(r) + \frac{h^2}{2m}\frac{\lambda}{r^2}\right)R = ER$$
$$\sin\theta\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d\Theta}{d\theta}\right) + \lambda\sin^2\theta\cdot\Theta - m^2\Theta = 0$$
$$-\frac{d\Phi}{d\phi^2} = m^2\Phi$$

に分離される.(ここで λ と m^2 は定数である.)

3　球面調和関数

$\varphi = R(r)Y(\theta,\phi)$ とおいて波動方程式を代入すると

$$-\frac{1}{Y}\left\{r^2\frac{1}{\sin\theta} + \frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{dY}{d\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2 Y}{\partial\phi^2}\right\} = \lambda$$

(λ は定数) として上式の Y について解くと規格化 $\int_0^{\pi} d\theta \int_0^{2\pi} d\phi |Y|^2 = 1$ の定数を含めると球面調和関数は次のようになる.

$$Y_{lm}(\theta,\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\sqrt{\frac{(2l+1)(l-|m|)!}{2(l+|m|)!}}P_l^{|m|}(\cos\theta)e^{im\phi}$$
$$(m = -l, -l+1, \cdots, l-1, l)$$

今後の課題

量子力学の原子の単元しか研究できなかったので他の単元も研究してみたいと思った. また, 水素原子と波動方程式の解についてもっと詳しく研究してみたいと思った.

参考文献

[1] 戸田盛和, 量子力学 30 講, 朝倉書店, 2007 年.

[2] 畠山温, 量子力学, 日本評論社, 2017 年.