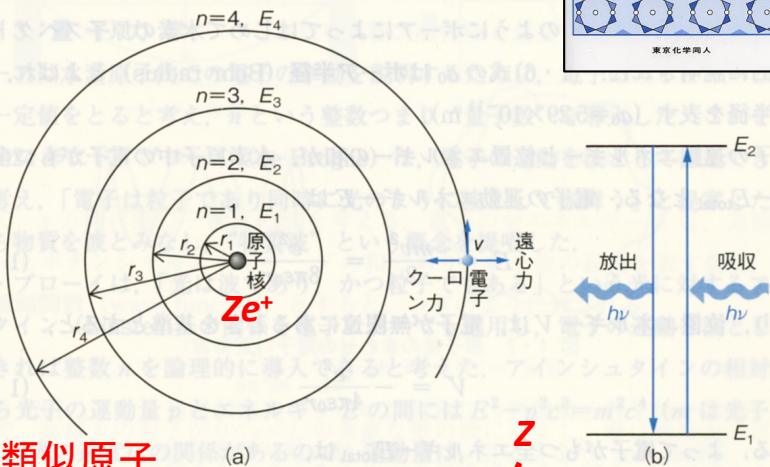
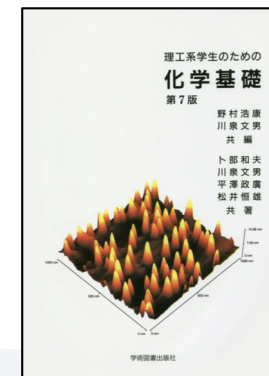
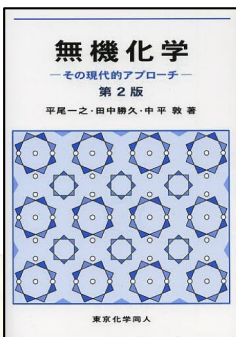


宿題[1]:



水素類似原子

図 1.6 ボーア模型 (a) および光の放出・吸収 (b)

ここでは水素原子を例として考えてみよう。 $+e$ の電荷をもつ 1 個の原子核の周辺を 1 個の電子 (質量 m , 電荷 $-e$) が、半径 r の円軌道上を速度 v で運動しているとすると、電子は mv^2/r の遠心力をもち、また ϵ_0 を真空の誘電率とすると、 $-e$ の電荷の電子は $+e$ の電荷をもつ原子核から $e^2/4\pi\epsilon_0 r^2$ のクーロン力を受ける。電子に働くこれらの遠心力とクーロン力は釣り合っている。したがって、下式が成立する。

$$\frac{mv^2}{r} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} \quad (1.4)$$

このとき電子の角運動量は mvr であり、電子はある決まった半径でしか運動できない。すなわち角運動量 mvr に対しては、下式のように $h/2\pi$ の整数倍の値のみ

水素類似原子

エネルギー状態の変化を状態の遷移 (transition of state) と呼び、 E_n なるエネルギー状態から E_m なるエネルギー状態への遷移により放射・吸収される光の振動数 ν は式 (3.3.2) で与えられる。

$$\nu = \frac{|E_n - E_m|}{h} \quad (3.3.2)$$

式 (3.3.2) はボーアの振動数条件 (Bohr's frequency condition) と呼ばれる。

水素原子にボーアの振動数条件を適用してみよう。図 3.8 のように、水素原子核 ($+e$ の電荷中心) のまわりの半径 r の 2 次元軌道上を速度 v で等速円運動する電子 (電荷 $-e$, 質量 m_e) を考える。

電子にはクーロン引力 $\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r^2}$ が作用している。ここで、 ϵ_0 は真空の誘電率である。電子の軌道運動の角速度を ω とすれば、遠心力と引力との釣り合いから式 (3.3.3) が成立する。

$$\frac{m_e v^2}{r} = m_e r \omega^2 = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} \quad (3.3.3)$$

一方、図 3.8 で表される電子の全エネルギー E は

$$\begin{aligned} E &= \text{運動エネルギー} + \text{ポテンシャルエネルギー} \\ &= \frac{1}{2} m_e v^2 + \left(-\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) \\ &= -\frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 r} \end{aligned} \quad (3.3.4)$$

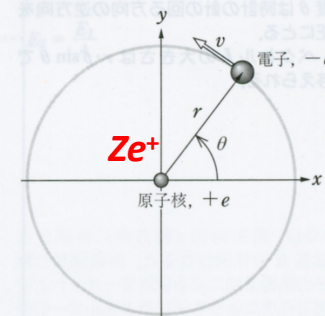


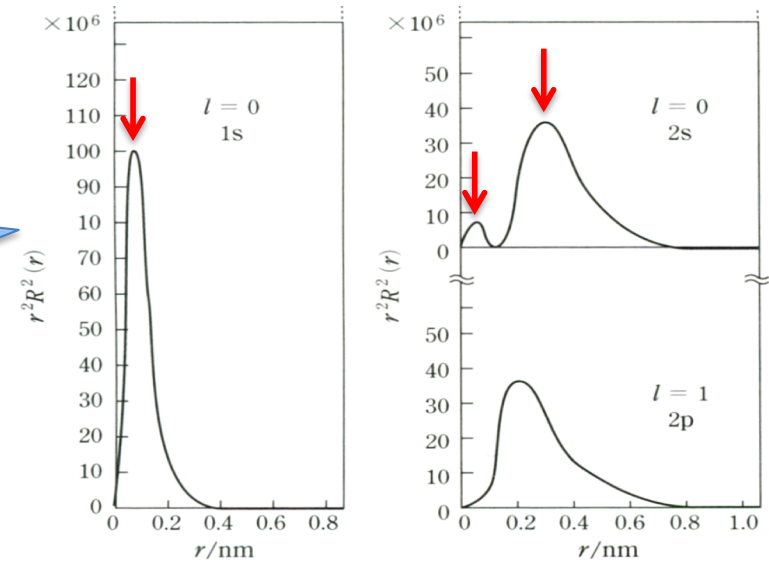
図 3.8 正の電荷中心 (原子核) の周囲を円運動する電子

1年次のときに

軌道半径や軌道エネルギーに対する n 依存性は分かった。 Z 依存性を導出しなさい。

宿題[3]: 1s および2s 軌道で最大の電子密度の場所、 a_0 単位で。
 ヒント: 動径分布関数 $4\pi r^2 \Psi^2$ が極値を持つ条件、導関数=0 の評価
 なので 4π と規格化因子は略すと楽.

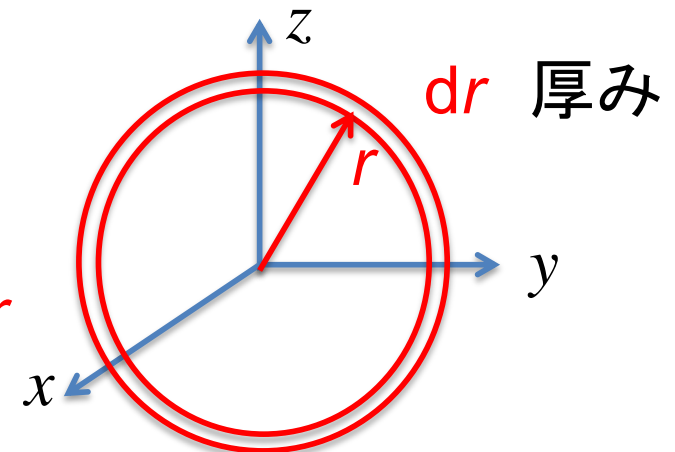
まず、 ψ_{1s} と ψ_{2s} を書いてください。
 百科事典などに掲載されているほ
 か、テキスト表1.1も利用できます。
 $\Psi(r, \theta, \phi) = R(r)Y(\theta, \phi)$ です。



電子密度は Ψ^2 で表される. 動径方向の積分について、微小球殻体積
 中の電子の存在確率が $\Psi^2 dv = 4\pi r^2 \Psi^2 dr$.

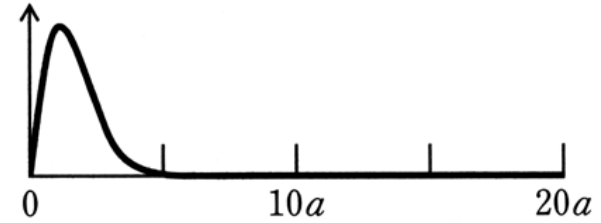
従って、**動径分布関数は $4\pi r^2 \Psi^2$.**

表面積 $4\pi r^2$
 球殻体積 $4\pi r^2 dr$



H26 国家公務員試験 化生薬 専門(多肢式)試験問題から

【No. 25】 図は水素原子の 1s 軌道の動径分布関数(動径確率密度関数)の概略を示したものである。水素原子の 2p 軌道の動径分布関数の概略として最も妥当なのはどれか。



ただし、横軸は動径であり、 a はボーア半径を表し、縦軸は任意単位で表されている。

