無機化学　2013年4月～2013年8月

水曜日1時間目114M講義室
第5回　5月15日

並進運動：箱の中の粒子・振動運動：調和振動子・
回転運動：球面調和関数

担当教員:福井大学大学院工学研究科生物応用化学専攻
教授　前田史郎
E-mail：smaeda@u-fukui.ac.jp
URL：http://acbio2.acbio.u-fukui.ac.jp/phychem/maeda/kougi
教科書：アトキンス物理化学（第8版）、東京化学同人
主に8・9章を解説するとともに10章・11章・12章を概要する

5月1日の解答例

自習問題8・5　cos axは，(a) d/dx，(b) d^2/dx^2の固有関数か？

$$(a)\ \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}(\cos ax) = -a\sin ax$$

cos axは，d/dxの固有関数ではない。

$$(b)\ \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}(\cos ax) = -a\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}(\sin ax) = -a^2(\cos ax)$$

cos axは，d^2/dx^2の固有関数である。

固有値は$-a^2$である。

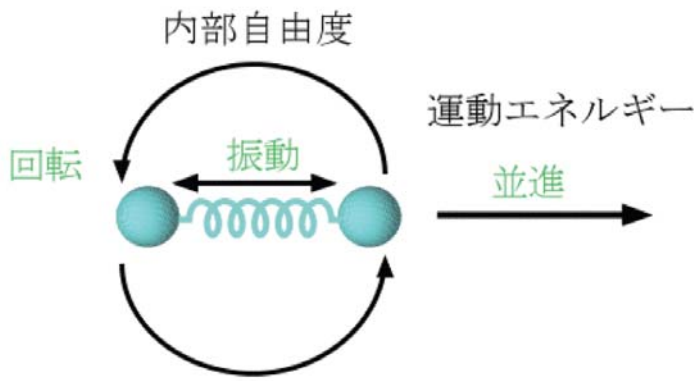
授業内容

１回　元素と周期表・量子力学の起源
２回　波と粒子の二重性・シュレディンガー方程式・波動関数のボルンの解釈
３回　並進運動：箱の中の粒子・振動運動：調和振動子・回転運動：球面調和関数
４回　角運動量とスピン・水素原子の構造と原子スペクトル
５回　多電子原子の構造・典型元素と遷移元素
６回　種々の化学結合：共有結合・原子価結合法と分子軌道法
７回　種々の化学結合：イオン結合・配位結合・金属結合
８回　分子の対称性(1)対称操作と対称要素
９回　分子の対称性(2)分子の対称による分類・構造異性と立体異性
10回　結晶構造(1)７晶系とブラベ格子・ミラー指数
11回　結晶構造(2)種々の結晶格子・Ｘ線回折
12回　遷移金属錯体の構造・電子構造・分光特性
13回　非金属元素の化学
14回　典型元素の化学
15回　遷移元素の化学

9章　量子論:手法と応用

量子力学にしたがって系の性質を見出すためには、その目的にかなったシュレディンガー方程式を解く必要がある。

この章では、「並進」、「振動」、「回転」を量子力学的に取り扱うことによって、波動関数とそのエネルギーを導く。この過程で自然に量子化が現れてくる。



○並進運動

1次元の自由運動のシュレディンガー方程式は

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\Psi}{\mathrm{d}x^2}=E\Psi}$$

（自由運動とは，ポテンシャルエネルギーがゼロの運動である）

あるいは、簡潔に表現すると、$\mathcal{H}\psi=E\psi$ である。

ここで、 $\hat{\mathcal{H}}=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\Psi}{\mathrm{d}x^2}$ である。

そして、一般解は

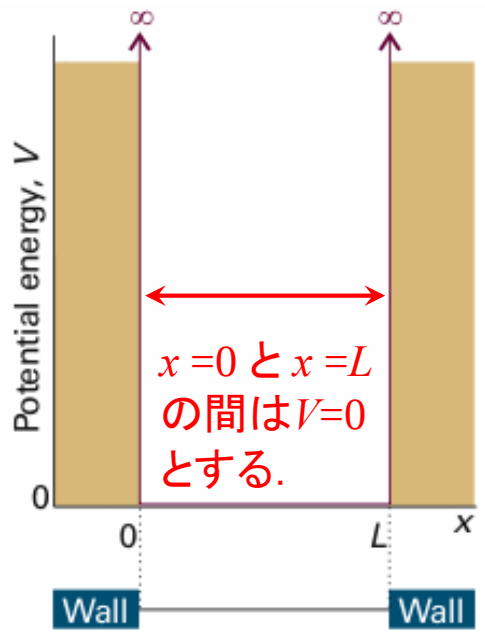
$$\boxed{\Psi=Ae^{ikx}+Be^{-ikx}}$$

である。

$$\boxed{E=\frac{k^2\hbar^2}{2m}}$$

9・1　箱の中の粒子(a particle in a box)

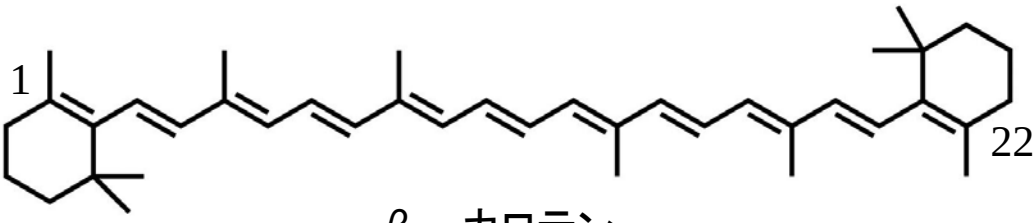
図9・1のようなポテンシャルにしたがう自由粒子、すなわち1次元の箱の中の粒子の問題を量子力学的に取り扱う。



質量mの粒子は、x=0 と x=L にある2つの無限の高さを持つ壁の間に閉じ込められている。簡単のために、この間のポテンシャルエネルギーはゼロとする。

図9・1　通り抜けることができない壁のある、1次元領域にある粒子。x=0 と x=L の間でポテンシャルエネルギーはゼロとする。

「箱の中の粒子」の問題は何の役に立つのか？



β－カロテン

二重結合と単結合が交互に連なったポリエンでは，炭素原子の数が増えると，光の吸収極大が長波長側にずれてくる。炭素鎖が長くなると，青，緑，赤色の可視光を吸収するので色が着いて見える。

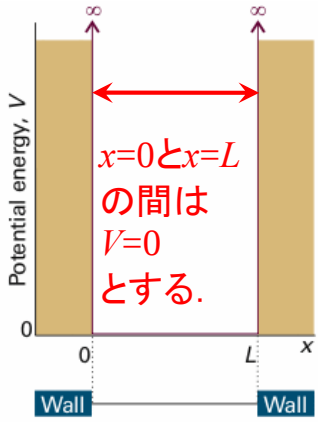
［数値例9・1］β－カロテンは直線形のポリエンで，22個の炭素原子鎖に沿って10個の単結合と11個の二重結合が交互に存在する。各CC結合長を140pmにとると，22個の炭素原子が作る箱の長さは0.294nmとなる。箱の中の粒子の問題を当てはめて，β－カロテンが吸収する波長を計算すると，1,240nmである。実験値は497nmであり，可視領域の光である。

○シュレディンガー方程式

壁の間の領域でポテンシャルエネルギーはゼロであるので、シュレディンガー方程式は「自由粒子」のものと同じになり、一般解も同じである。

シュレディンガー方程式

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\Psi}{\mathrm{d}x^2}=E\Psi$$



一般解

$$\Psi_k(x)=C\sin kx+D\cos kx,\qquad E_k=\frac{k^2\hbar^2}{2m}$$

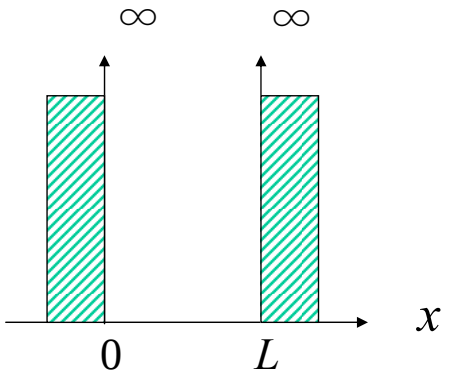
$$\Psi_k(x)=Ae^{ikx}+Be^{-ikx}=A(\cos kx+i\sin kx)+B(\cos kx-i\sin kx)$$
$$=(A+B)\cos kx+(A-B)i\sin kx=C\sin kx+D\cos kx$$

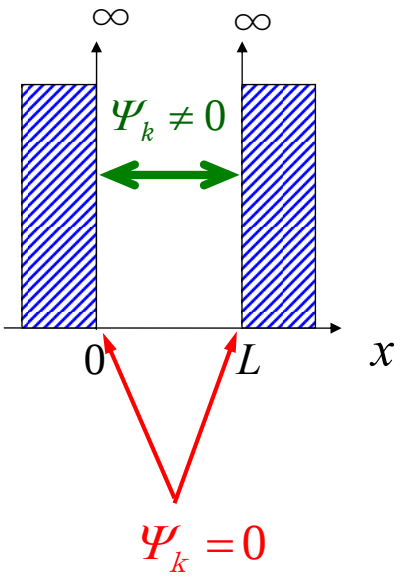
(a) 許される解

○自由粒子　　E_kのあらゆる値が許される。

古典力学の結果と一致する。

○束縛粒子　　粒子がある領域に閉じ込められているときは、一定の境界条件を満たす波動関数しか許されない。E_kがとり得る値が不連続になる（量子化される）。





$$\begin{cases} x<0,\quad x>L & \text{で}\quad V=\infty \\ 0\le x\le L & \text{で}\quad V=0 \end{cases}$$

とする。

$x<0, x>L$　の領域では　$\Psi=0$

境界条件

$$\begin{cases} \Psi_k(0)=0 \\ \Psi_k(L)=0 \end{cases}$$

粒子が，貫入できない無限大の高さの壁のある領域に閉じ込められているときは，一定の境界条件を満たす波動関数しか許されない．この境界条件のために，運動エネルギー，E_kがとり得る値が不連続になる，すなわち量子化される．

一般解

$$\Psi_k(x) = C\sin kx + D\cos kx, \qquad E_k = \frac{k^2\hbar^2}{2m}$$

境界条件 $\begin{cases} \Psi_k(0) = 0 \\ \Psi_k(L) = 0 \end{cases}$

$\Psi_k^{(1)}(x) = D\cos kx$ は $\Psi_k^{(1)}(0) \neq 0$であるから除外される。

$\Psi_k^{(2)}(x) = C\sin kx$ は $kL = n\pi, n = 1,2,...$のとき、

$\Psi_k^{(2)}(0) = \Psi_k^{(2)}(\mathrm{L}) = 0$であり

境界条件を満たす。

$$\boxed{\begin{aligned} &kL = n\pi \\ &\therefore k = \frac{n\pi}{L} \end{aligned}}$$

したがって、解は

$$\Psi_n(x) = C\sin\frac{n\pi x}{L}, \qquad n = 1,2,\cdots$$

$$En = \frac{k^2\hbar^2}{2m} = \left(\frac{n\pi}{L}\right)^2 \frac{\hbar^2}{2m} = \frac{n^2h^2}{8mL^2}$$

(b)規格化

規格化条件 $\int_0^L \Psi^2 \mathrm{d}x = 1$

$$\int_0^L \Psi_n{}^2(x)\mathrm{d}x = C^2\int_0^L \sin^2\frac{n\pi x}{L}\mathrm{d}x = \frac{C^2L}{2}$$

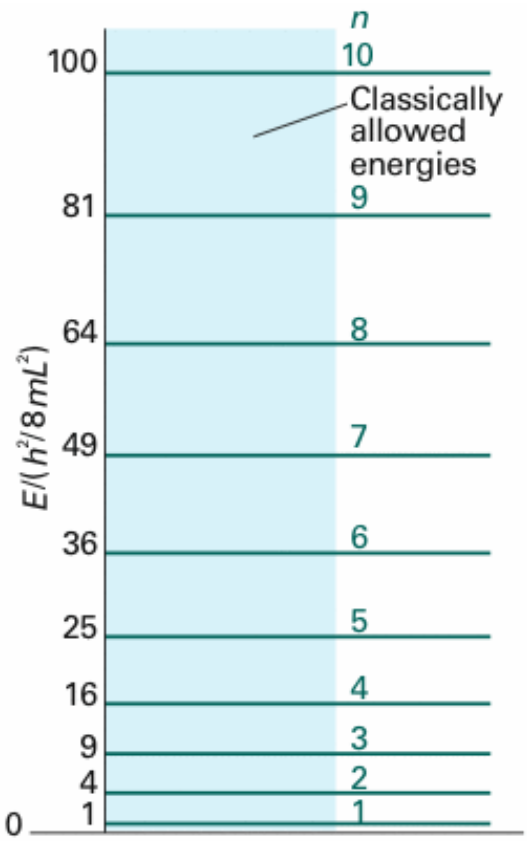
したがって、

$$C = \left(\frac{2}{L}\right)^{\frac{1}{2}}$$

◎$0 < x < L$の領域に閉じ込められた粒子の波動関数とエネルギー

$$\Psi_n(x) = \left(\frac{2}{L}\right)^{1/2}\sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right), \qquad n = 1,2,\cdots$$

$$En = \frac{n^2h^2}{8mL^2}$$



◎$0<x<L$の領域に閉じ込められた粒子の波動関数とエネルギー

$$\Psi_n(x)=\left(\frac{2}{L}\right)^{1/2}\sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right),\qquad n=1,2,\cdots$$

$$En=\frac{n^2h^2}{8mL^2}$$

図9･2　箱の中の粒子に対して許されるエネルギー準位．エネルギー準位がn^2の形で増加するから，準位間隔が量子数の増加とともに増加することに注意せよ．

（c）解の性質

波動関数ψ_nは、

(1)定在波である。　→量子化

(2)n-1個の節(node)を持つ

(3)ゼロ点エネルギー　$E_1=\dfrac{h^2}{8mL^2}$　を持つ

粒子のとり得る最低エネルギーはゼロではない。（古典力学ではゼロが許されていて，静止した粒子に相当する）

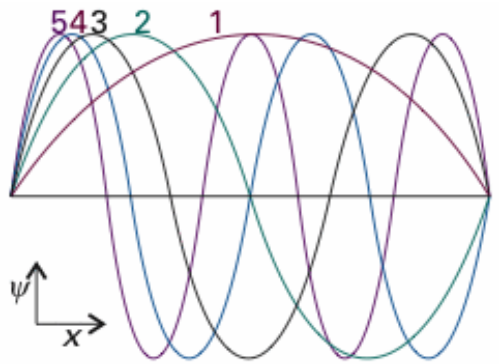


図9･3　箱の中の粒子の最初の5つの規格化した波動関数の例。各波動関数は定在波である。

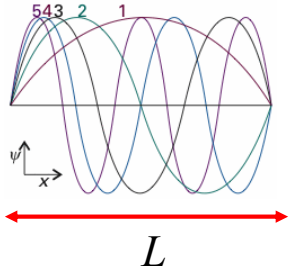
根拠9・1　箱の中の粒子のエネルギーの導出

ド・ブローイの関係式と波動関数の境界条件から，箱の中の粒子のエネルギーを求めよ．

[解法]箱にちょうどあてはまるには，距離Lが半波長のn倍でなければならない．

$$L = n \times \frac{1}{2}\lambda \qquad n = 1,2,\ldots$$

$$\lambda = \frac{2L}{n} \qquad n = 1,2,\ldots$$



波長 λ と運動量 p の間にはド・ブローイの関係式が成り立つ．

$$p = \frac{h}{\lambda} = \frac{nh}{2L}$$

したがって，許されるエネルギーは

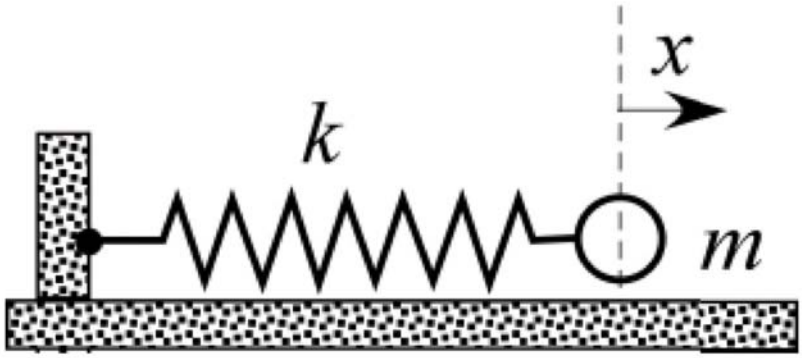
$$E_n = \frac{p^2}{2m} = \frac{n^2h^2}{4L}\frac{1}{2m} = \frac{n^2h^2}{8mL}$$

○振動運動

粒子が，その変位に比例する復元力，

$$F = -kx$$

を受けると，調和振動(harmonic motion)を行う．バネをxだけ伸ばすと，伸ばした長さに比例してバネが縮まろうとする力が働く．kは力の定数である．



調和振動子

力FはポテンシャルエネルギーVと，次の関係がある．

$$F = -\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}x}$$

したがって，調和運動の力FはポテンシャルエネルギーV，

$$V = \frac{1}{2}kx^2$$

に相当する．

シュレディンガー方程式は次のように書ける。

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\Psi}{\mathrm{d}x^2} + \frac{1}{2}kx^2\Psi = E\Psi \qquad (9\cdot24)$$

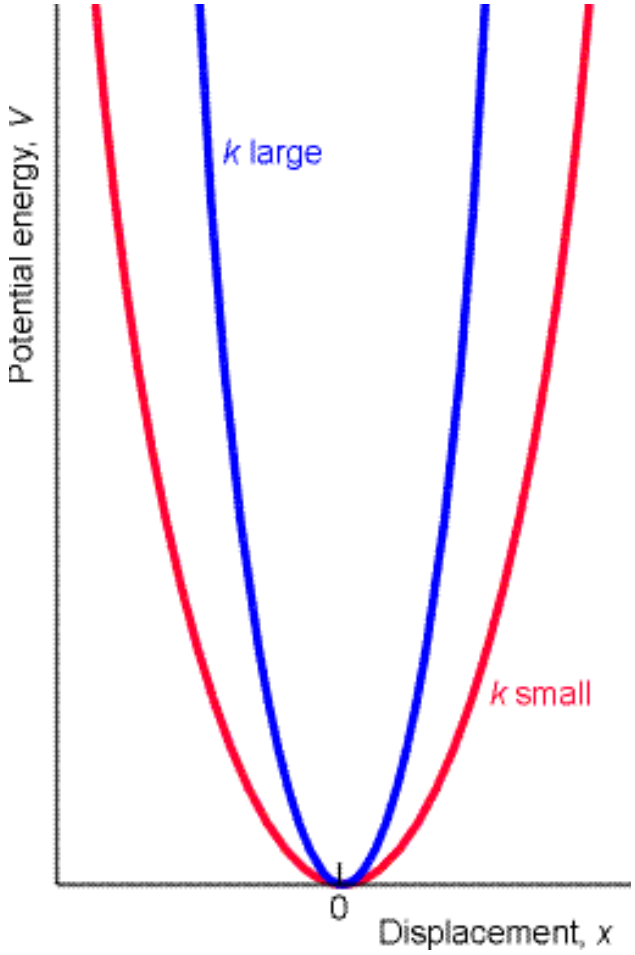
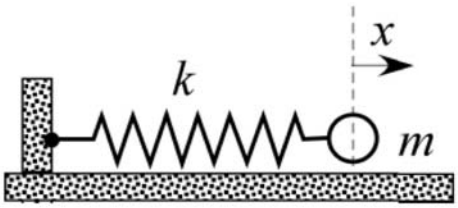


図13.27
調和振動子の放物線ポテンシャルエネルギー
$V = 1/2\ kx^2$.
ここで，x は平衡位置からの変位である。曲線の狭さは力の定数 k に依存している。k が大きいと，同じ変位を起こさせるのに大きな力を加えなければならない（堅いバネ）。



9・4　エネルギー準位

9・5　波動関数

調和振動子のシュレディンガー方程式は、良く知られた微分方程式であり、その解は、

$$\Psi_v(x) = N_v H_v(y) e^{-\frac{y^2}{2}}$$

ここで、

$$y = \frac{x}{\alpha}, \qquad \alpha = \left(\frac{\hbar^2}{mk}\right)^{\frac{1}{4}}$$

H_v(y)はエルミート(Hermite)多項式と呼ばれている。

表9・1　エルミート多項式　$H_v(y)$

v	H_v
0	1
1	$2y$
2	$4y^2 - 2$
3	$8y^3 - 12y$
4	$16y^4 - 48y^2 + 12$

例えば、$H_0(y)$＝1であるから、調和振動子の基底状態（$v = 0$）（最低エネルギー状態）の波動関数は次式となる。

$$\Psi_0(x) = N_0 e^{-\frac{y^2}{2}} = N_0 e^{-\frac{x^2}{2\alpha^2}}$$

調和振動子に許されるエネルギー準位は

$$E_v = \left(v + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega, \qquad \omega = \left(\frac{k}{m}\right)^{\frac{1}{2}}, \qquad v = 0,1,2,3.....$$

である。隣り合う準位の間隔は

$$E_{v+1} - E_v = \hbar\omega$$

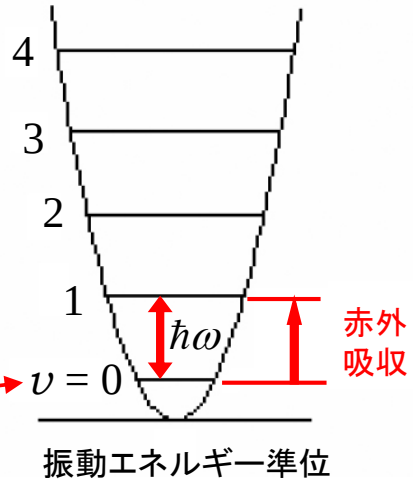
となり、すべてのvに対して同じである。

vの許される最小値は0であるから、

調和振動子は零点エネルギー

$$E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$$

を持つ。



①振動エネルギー準位間隔は$\hbar\omega$であり，一定である。
②最低エネルギーは(1/2) $\hbar\omega$であり，ゼロ点エネルギーがある。

二原子分子の調和振動子モデル

モデル：分子＝ばねでつながった原子

r：核間距離、r_e：平衡核間距離

x：変位($x=r-r_e$)、k_f：ばね定数

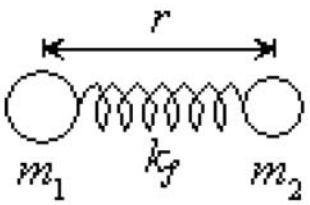


図 2.1 調和振動子モデル

ポテンシャルエネルギー $V(x) = \frac{1}{2}k_f x^2$

古典運動方程式 $\mu\frac{d^2x}{dt^2} = -k_f x$
(f=ma)

μ：換算質量(m_1,m_2：原子1,2の質量)

$$\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$$

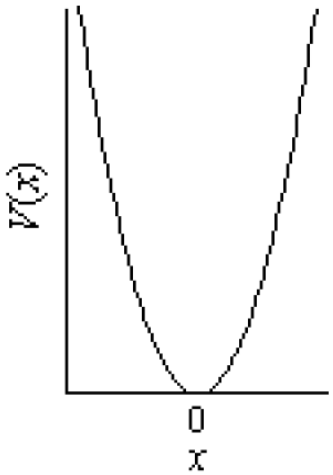


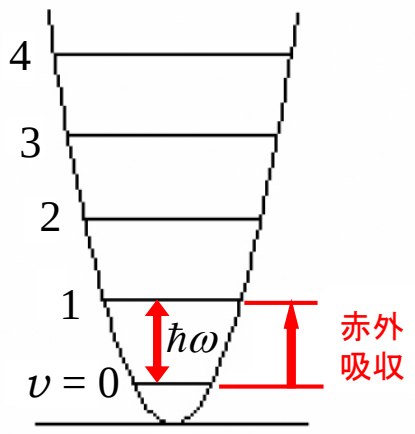
図 2.2 ポテンシャル

振動数

$$\nu = \frac{1}{2\pi}\sqrt{\frac{k_f}{\mu}}$$

エネルギー準位

$$E_v = \left(v + \frac{1}{2}\right)h\nu, \quad v = 0,1,2,3.....$$



振動エネルギー準位

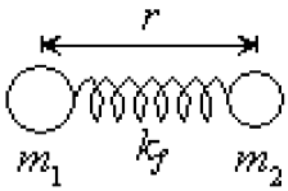
二原子分子の赤外吸収, cm^{-1} (μm)

HCl	2886 (3.47)
NO	1876 (5.33)
CO	2143 (4.67)

EX

ばね定数 k_f [N m^{-1}] と結合次数, 結合解離エネルギー D [kJ mol^{-1}]

	k_f	結合次数	D
HBr	384	1	366
Cl_2	318	1	243
O_2	1139	2	498
NO	1548	2.5	632
CO	1855	3	1076
N_2	2241	3	945



ばね定数が大きいほど, 堅いばねである. 三重結合を持つN_2のk_fは大きい. 一方, 塩素分子の単結合はk_fが小さく柔らかい結合である.

数値例9・3　分子振動の吸収振動数の計算

代表的なX-H型の化学結合の力の定数は500Nm^{-1}くらいである。プロトンの質量はほぼ1.7×10^{-27}kgであるから（電子の質量は無視できる）

$$\omega = \sqrt{\frac{k}{m}} = \sqrt{\frac{500 \quad \mathrm{kgms^{-2}m^{-1}}}{1.7\times10^{-27} \quad \mathrm{kg}}} = 5.4\times10^{14} \quad \mathrm{s^{-1}}$$

となり，隣接準位間の間隔ΔEは

$$\Delta E = \hbar\omega = 1.05\times10^{-34}\,\mathrm{Js}\times5.4\times10^{14}\,\mathrm{s^{-1}}$$
$$= 5.7\times10^{-20}\,\mathrm{J}$$
$$= \frac{5.7\times10^{-20}\,\mathrm{J}}{1.60\times10^{-19}\,\mathrm{JeV^{-1}}} = 0.36\mathrm{eV}$$

１モルあたりにすると，

$$\Delta E = \hbar\omega = 5.7\times10^{-20}\,\mathrm{J}\times6.02\times10^{23}\,\mathrm{mol^{-1}} = 34\mathrm{kJmol^{-1}}$$

結合の振動を一つの準位から直ぐ上の準位に励起するには，振動数νが

$$\nu = \frac{\Delta E}{h} = \frac{5.7\times10^{-20}\,\mathrm{J}}{6.63\times10^{-34}\,\mathrm{Js}} = 8.6\times10^{13}\,\mathrm{s^{-1}}$$

したがって，波長λが

$$\lambda = \frac{c}{\nu} = \frac{3.0\times10^{8}\,\mathrm{ms^{-1}}}{8.6\times10^{13}\,\mathrm{s^{-1}}} = 3.5\times10^{-6}\,\mathrm{m} = 3.5\mu\mathrm{m}$$

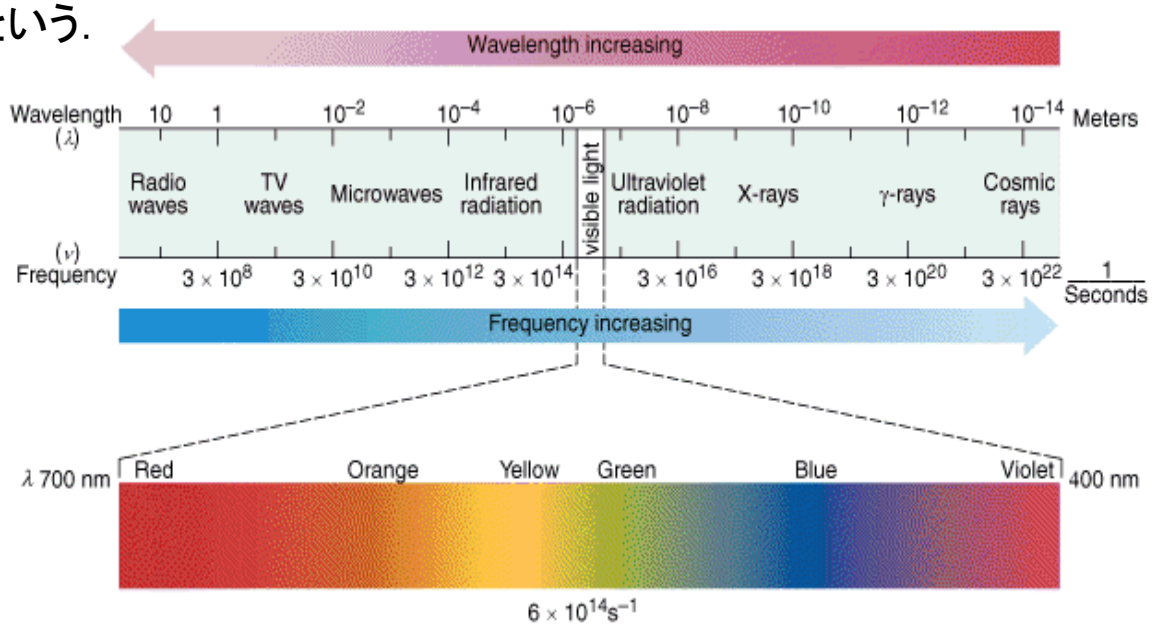
の電磁波が必要となる。だから，分子の隣接振動エネルギー準位間の遷移は赤外線で刺激され，あるいは赤外線を放出することになる。

赤外線あるいは遠赤外線は，ヒトの目には感じられないが物質の振動エネルギー準位を励起させるので，暖かく感じる。

EX

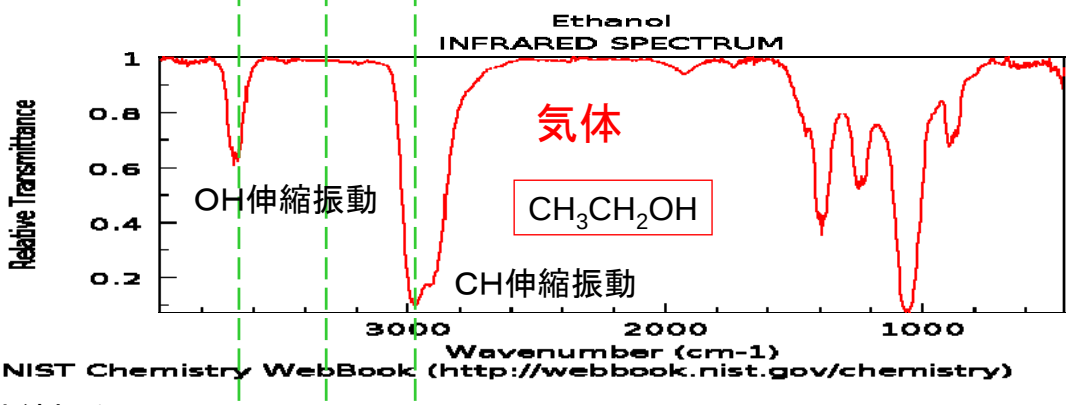
電磁波スペクトル

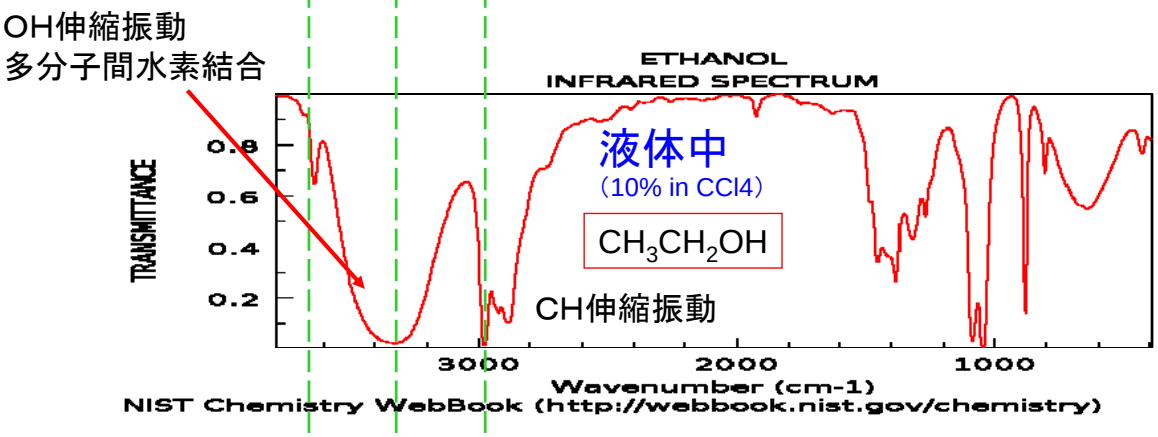
電磁波は，波長の短い，宇宙線，γ線から，波長の長いマイクロ波，ラジオ波まで広く分布している．可視領域の電磁波を光という．



EX

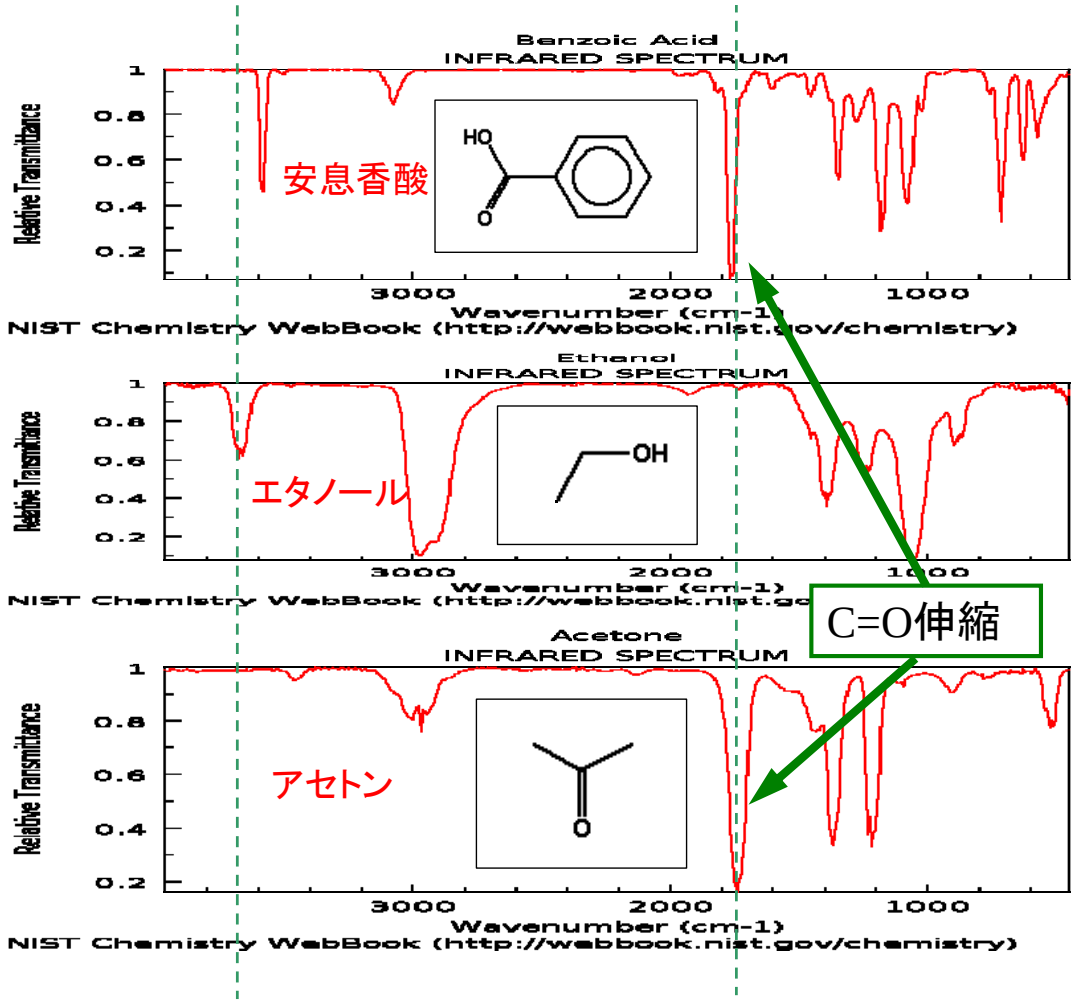
同じ分子でも、赤外吸収スペクトルは環境により変化を受ける





（米国標準局のホームページ参照）

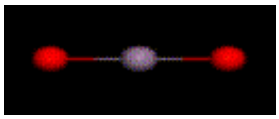
EX

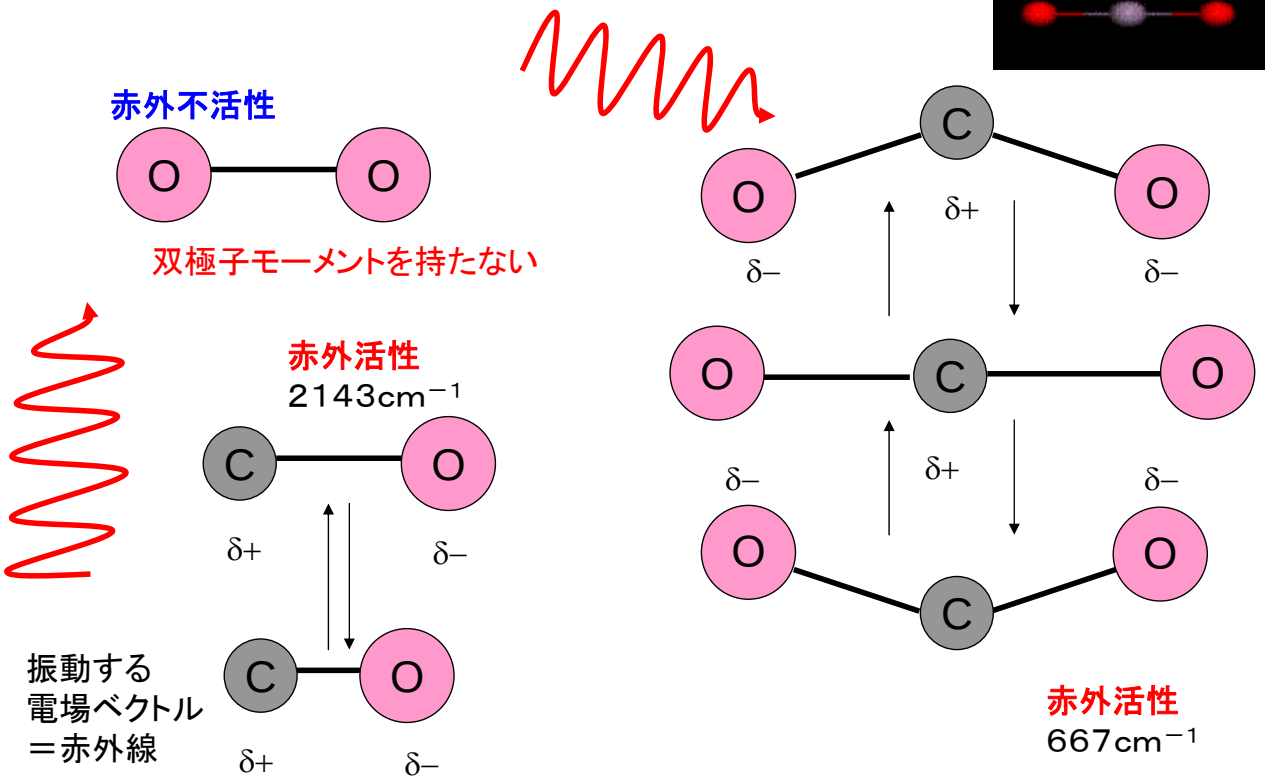


特性吸収帯の重ね合わせで表現できる

13・10選択律

振動遷移が赤外線を吸収して遷移できるかどうか

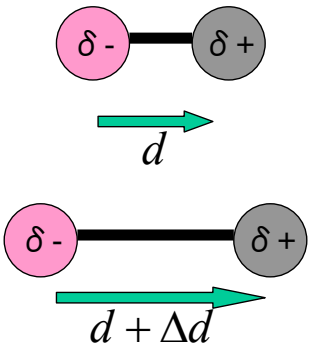




双極子モーメントが，ある基準振動により変化すれば，その基準振動は赤外活性

EX

電気双極子モーメントμと分極率α



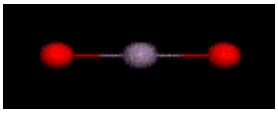
$$\mu = d\delta$$

電気双極子モーメントが振動によって変化する

$$\mu = d\delta + \Delta d\delta$$

赤外活性

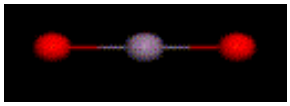
（対称伸縮振動）
振動によって



ラマン活性：分極率αが変化する.

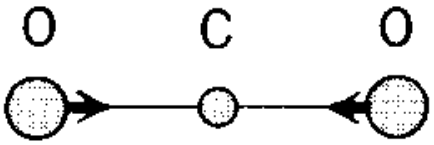
赤外不活性：双極子モーメントμはない.

（逆対称伸縮振動）
振動によって

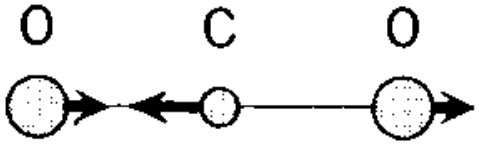


ラマン不活性：分極率αは変化しない.

赤外活性：双極子モーメントμが変化する.



赤外不活性　ラマン活性



赤外活性　ラマン不活性

選択律の違い—赤外吸収とラマン散乱の使い分け

487

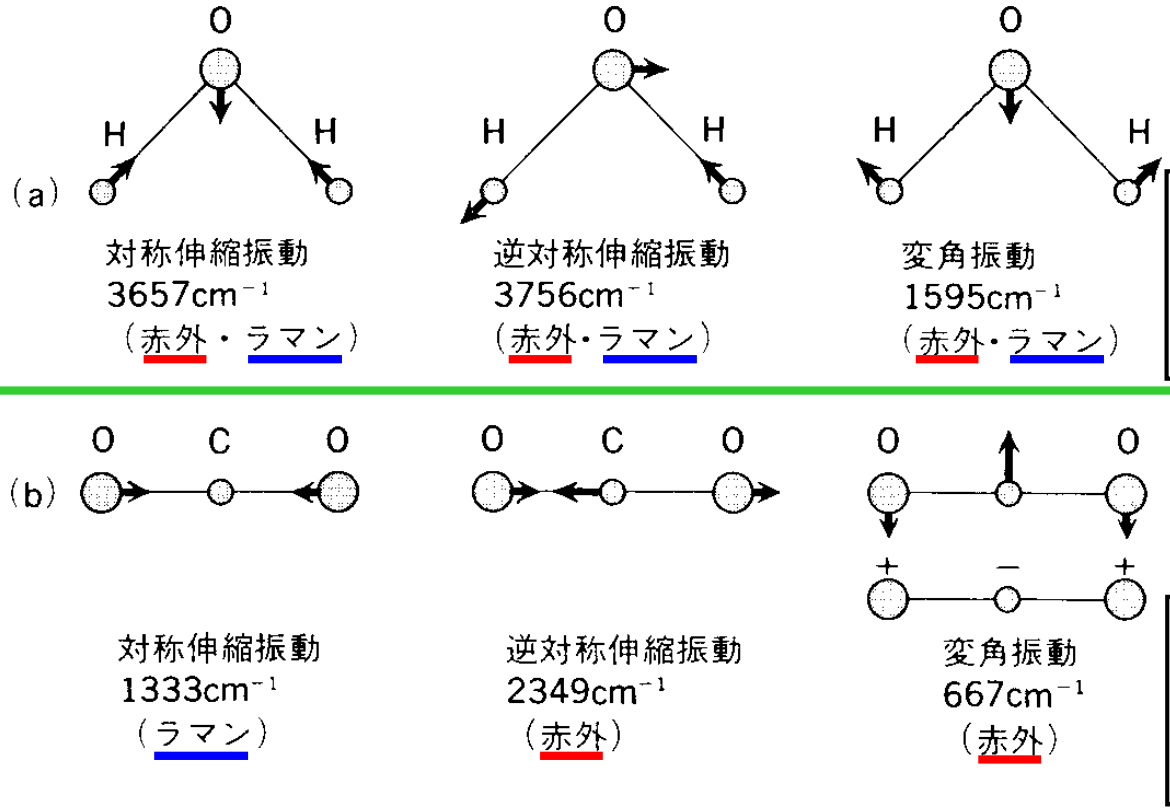
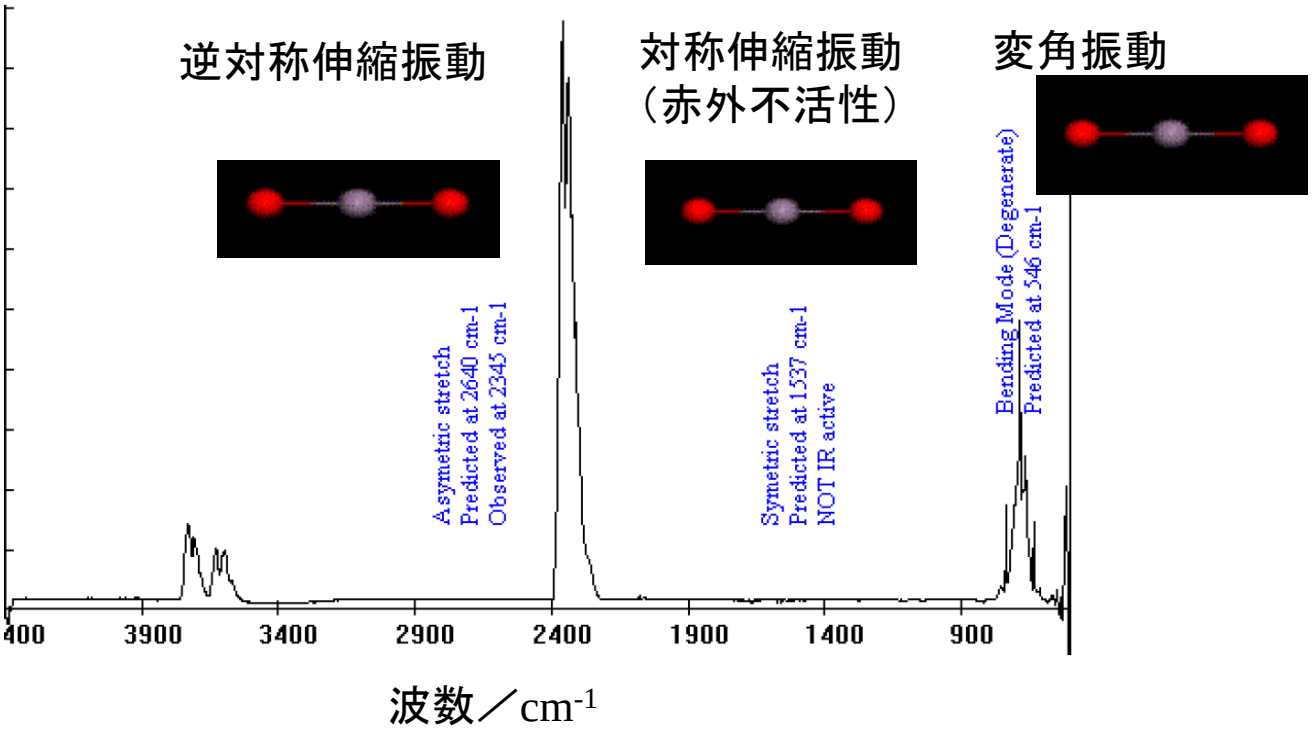
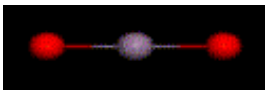


図 4・2　水(a)および二酸化炭素(b)の基準振動

CO_2のIRスペクトル

EX





変角振動（上と同じだが見る方向が90°異なる）

EX

回転運動と水素原子の電子の運動

	半径r	ポテンシャルエネルギー	波動関数$\psi(r,\ \theta,\ \phi)$		
			動径部分$R_{n,l}(r)$	角度部分$Y_{l,m}(\theta,\ \phi)$	
				$\Theta(\theta)$	$\Phi(\phi)$
平面（円）上の2次元回転運動	一定	ゼロ			$e^{\pm i m_l \phi}$
球面上の3次元回転運動	一定	ゼロ		$P_l^{\lvert m_l \rvert}(\cos\theta)$	
水素原子の電子の運動	変数	クーロン引力 $V=-\dfrac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r}$	$(\dfrac{\rho}{n})^l L_{n,l} e^{-\frac{\rho}{2n}}$		

$Y_{l,m}(\theta,\ \phi)$ ：球面調和関数

$L_{n,l}$ ：ラゲール多項式

$P_l^{|m_l|}(\cos\theta)$ ：ルジャンドル多項式

$n=1,2,3\cdots$

$l=0,1,2,\cdots,n-1$

$m_l=-l,-l+1,\cdots,l-1,l$

二原子分子の剛体回転子モデル
（詳細については「13章分子分光学」参照）

モデル：分子＝棒でつながった原子

m_1, m_2：原子1,2の質量

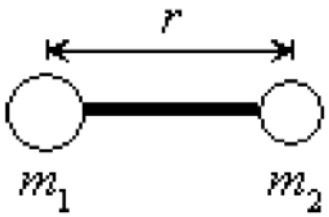


図 3.1 剛体回転子モデル

二原子分子の慣性モーメント

$$I = \mu r^2$$

古典回転エネルギーと角運動量

$$E = \tfrac{1}{2} I\omega_x^2 + \tfrac{1}{2} I\omega_y^2 = \frac{J^2}{2I}$$

$$J^2 = J_x^2 + J_y^2 = (I\omega_x)^2 + (I\omega_x)^2$$

直線分子＝二次元回転子

三次元の回転運動

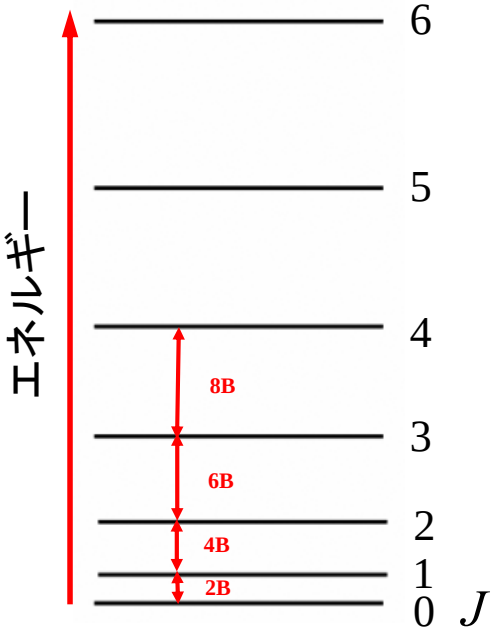
エネルギー準位と多重度

$$E = J(J+1)\frac{\hbar^2}{2I}, \qquad J = 0,1,2,\cdots$$

多重度 $g_J = 2J + 1$

Jの与えられた値に対して，m_Jの許される値が$2J + 1$個ある。すなわち，各エネルギー準位の多重度は$2J + 1$である。

回転エネルギー準位間隔は，$2B(J+1)$であり，$J \to J+1$の遷移で$J=0$のとき$2B$，$J=1$のとき$4B$，$J=2$のとき$6B$である．



回転エネルギー準位

①回転エネルギー準位間隔は，$2B(J+1)$であり，一定ではない。
②吸収線の間隔は$2B$であり，一定間隔である．
③最低エネルギーはゼロであり，ゼロ点エネルギーはない。

分子の振動と回転は同時に起こるので，二原子分子では振動回転スペクトルが観測される。

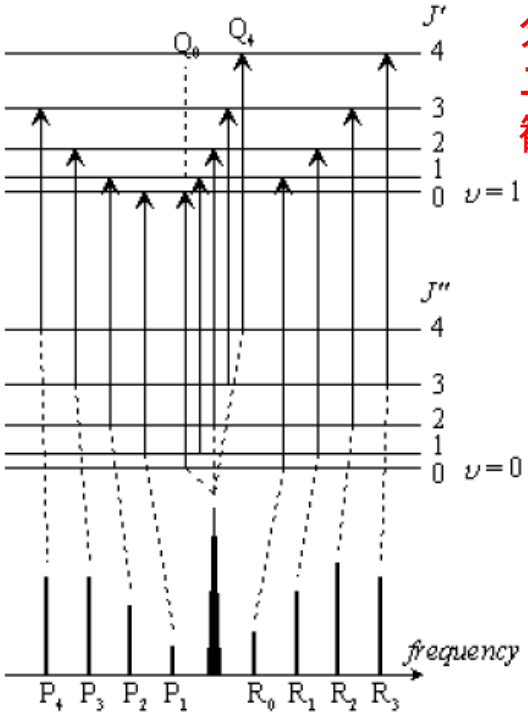
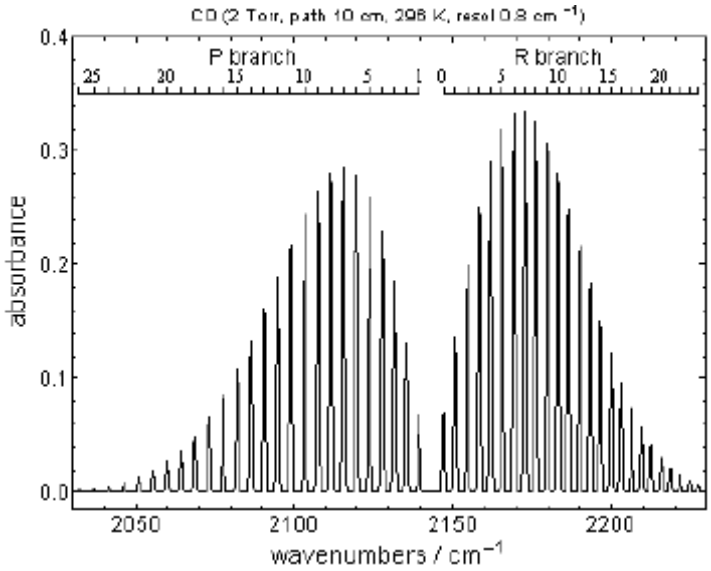


図 3.10 スペクトル枝

二原子分子の振動回転エネルギー準位



COの振動回転スペクトル

剛体回転子の問題は，分子の回転スペクトルから，原子の質量や結合長を決定するときに応用できる。

$$E_J = J(J+1)\frac{\hbar^2}{2I}, \qquad J = 0,1,2,\cdots$$

$$\Delta E_{J\leftarrow J-1} = E_J - E_{J-1} = hc2B(J+1)$$

$$\Delta E_{J+1\leftarrow J} = E_{J+1} - E_J = hc2BJ$$

$$\therefore \Delta(\Delta E) = \Delta E_{J\leftarrow J-1} - \Delta E_{J+1\leftarrow J} = hc2B$$

$$\Delta(\Delta\tilde{\nu}) = 2B$$

回転定数B

$$hcB = \frac{\hbar^2}{2I}$$

$$\therefore B = \frac{\hbar}{4\pi cI}$$

$$\Delta E = h\nu$$

$$\frac{\Delta E}{hc} = \frac{h\nu}{hc} = \frac{\nu}{c} = \frac{1}{\lambda} = \tilde{\nu}$$

回転スペクトルの吸収線は等間隔(2B)である。

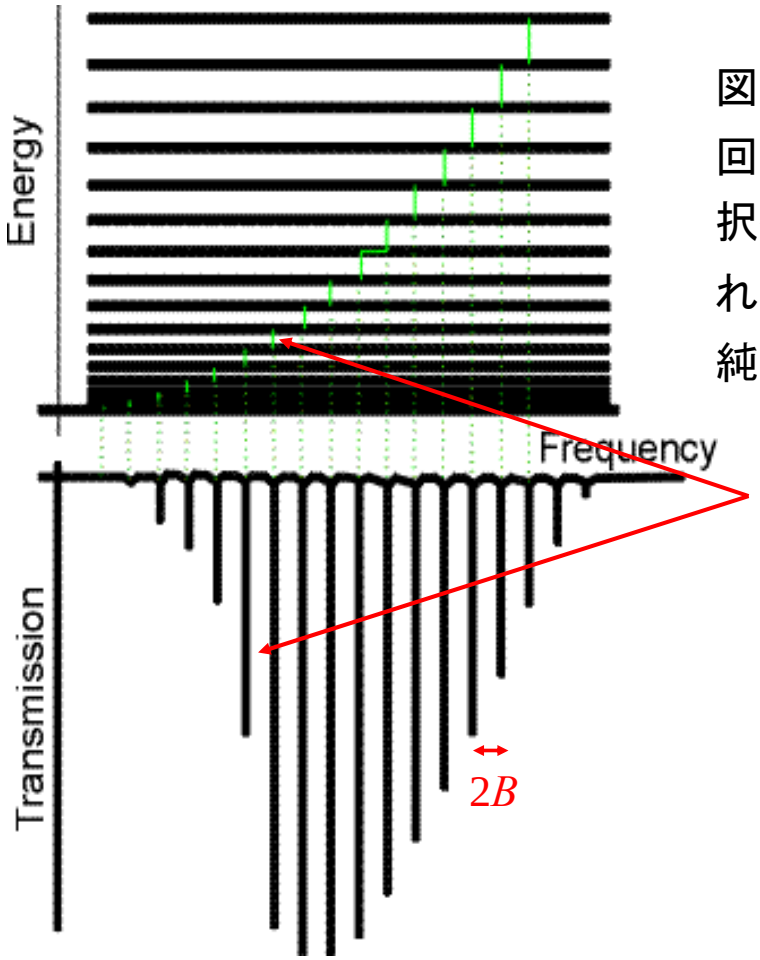


図13・19　直線回転子の回転エネルギー準位と，選択律⊿J=±1によって許される遷移，および代表的な純回転スペクトル．

エネルギー準位が高くなるに連れて，占拠数は指数関数的に減少するはずだが途中まで強度が増大している．回転準位の場合は各準位の多重度は2J+1である．高いエネルギー準位ほど多重度が増すので，収容できる粒子の数は増えるので，吸収強度はどこかで極大になり，その後は単調に減少する．

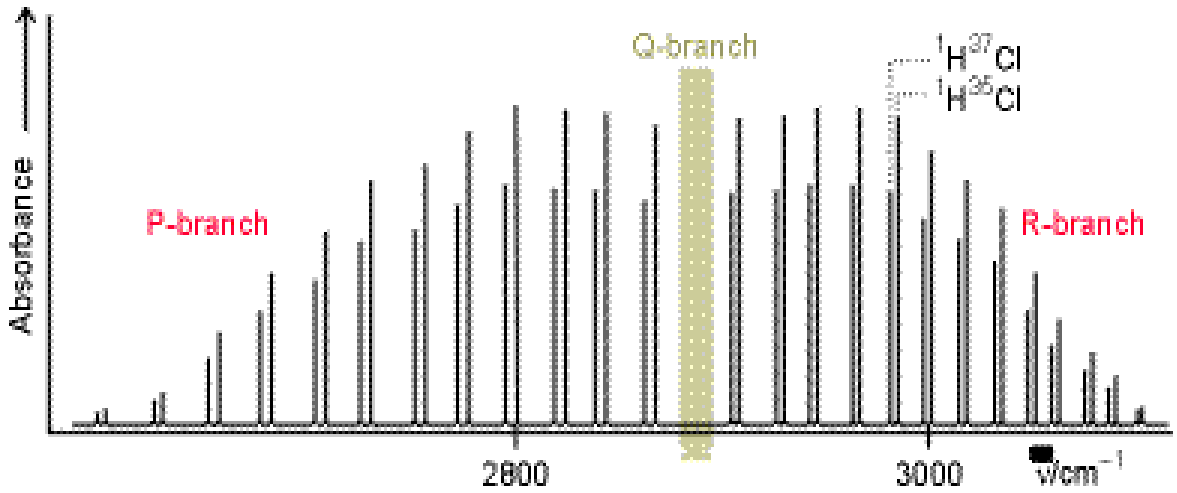
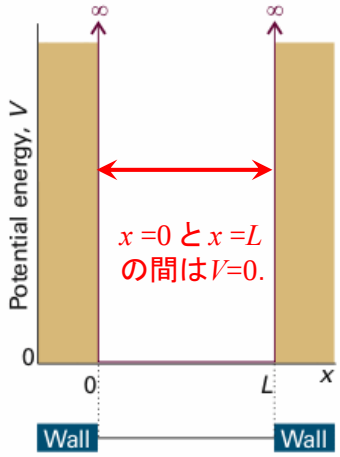
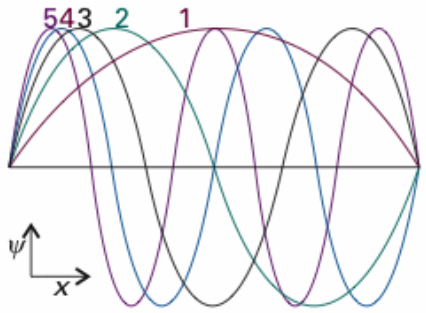


図13・34　HClの高分解能振動回転スペクトル．　$H^{35}Cl$と$H^{37}Cl$の両方が寄与するので（天然存在比は3：1である），吸収線は対になって現れる．

本日のポイント（1）　箱の中の粒子(a particle in a box)の問題　287



箱の中の粒子のポテンシャルエネルギー



箱の中の粒子の最初の5つの規格化した波動関数

〇解の性質

$$\Psi_n(x)=\left(\frac{2}{L}\right)^{1/2}\sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right),\qquad n=1,2,\cdots$$

$$En=\frac{n^2h^2}{8mL^2}$$

箱の中の粒子の波動関数 ψ_n は、

(1)定在波である。 →量子化

(2)n-1個の節(node)を持つ

(3)ゼロ点エネルギーを持つ

$$E_1=\frac{h^2}{8mL^2}$$

（粒子のとり得る最低エネルギーはゼロではない）

本日のポイント（2）　300

調和振動子に許されるエネルギー準位は

$$E_\upsilon=\left(\upsilon+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega,\qquad \omega=\left(\frac{k}{m}\right)^{\frac{1}{2}},\qquad \upsilon=0,1,2,3.....$$

である。隣り合う準位の間隔は

$$E_{\upsilon+1}-E_\upsilon=\hbar\omega$$

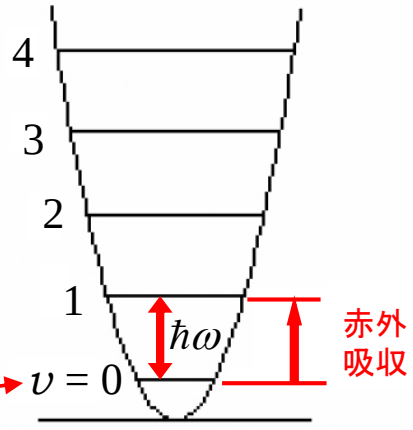
となり、すべてのυに対して同じである。

υの許される最小値は0であるから、

調和振動子は零点エネルギー

$$E_0=\frac{1}{2}\hbar\omega$$

を持つ。



振動エネルギー準位

①振動エネルギー準位間隔は$\hbar\omega$であり，一定である。
②最低エネルギーは(1/2) $\hbar\omega$であり，ゼロ点エネルギーがある。

本日のポイント(3)

三次元の回転運動

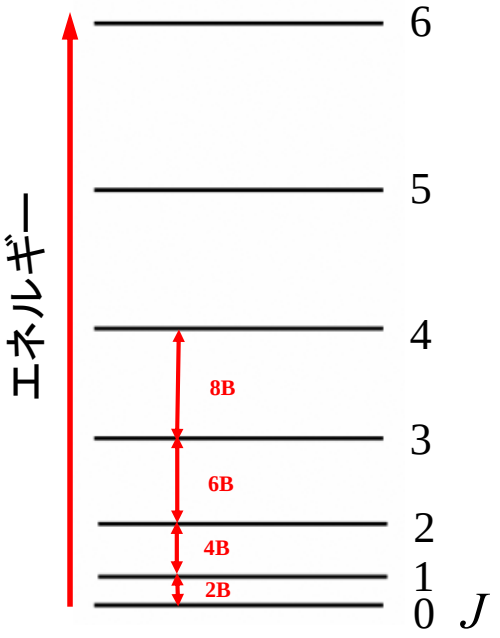
エネルギー準位と多重度

$$E = J(J+1)\frac{\hbar^2}{2I}, \qquad J = 0,1,2,\cdots$$

多重度 $g_J = 2J+1$

Jの与えられた値に対して，m_Jの許される値が$2J+1$個ある。すなわち，各エネルギー準位の多重度は$2J+1$である。

回転エネルギー準位間隔は，$2B(J+1)$であり，$J \to J+1$の遷移で$J=0$のとき$2B$，$J=1$のとき$4B$，$J=2$のとき$6B$である．



回転エネルギー準位

①回転エネルギー準位間隔は，$2B(J+1)$であり，一定ではない。
②吸収線の間隔は$2B$であり，一定間隔である．
③最低エネルギーはゼロであり，ゼロ点エネルギーはない。

本日のポイント(4)

回転運動と水素原子の電子の運動

	半径r	ポテンシャルエネルギー	波動関数$\psi(r,\ \theta,\ \phi)$		
			動径部分$R_{n,l}(r)$	角度部分$Y_{l,m}(\theta,\ \phi)$	
				$\Theta(\theta)$	$\Phi(\phi)$
平面(円)上の2次元回転運動	一定	ゼロ			$e^{\pm i m_l \phi}$
球面上の3次元回転運動	一定	ゼロ		$P_l^{\lvert m_l \rvert}(\cos\theta)$	
水素原子の電子の運動	変数	クーロン引力 $V = -\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r}$	$(\frac{\rho}{n})^l L_{n,l} e^{-\frac{\rho}{2n}}$		

$Y_{l,m}(\theta,\ \phi)$:球面調和関数

$L_{n,l}$:ラゲール多項式

$P_l^{|m_l|}(\cos\theta)$:ルジャンドル多項式

$$n = 1,2,3\cdots$$
$$l = 0,1,2,\cdots,n-1$$
$$m_l = -l,-l+1,\cdots,l-1,l$$

第9章

□1　自由な粒子の波動関数は $\Psi = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$ であって、

$E = k^2\hbar^2/2m$ である.

□2　長さLの一次元の箱の中の粒子の波動関数とエネルギーは、

それぞれ $\Psi_n(x) = \left(\frac{2}{L}\right)^{1/2} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right), \quad n = 1,2,\cdots, \quad En = \frac{n^2h^2}{8mL^2}$

である。ゼロ点エネルギー、つまり許される最低のエネルギーは

$E_1 = \frac{h^2}{8mL^2}$ である。

□3　対応原理とは，量子力学で大きな量子数に到達すると古典力学が現れてくる，という原理である。

□8　調和運動とは、変位に比例する復元力、$F=-kx$の存在のもとでの運動である。ここで、kは力の定数である。その結果、

$V=(1/2)kx^2$となる。

□9　量子力学的な調和振動子の波動関数とエネルギーは、それぞれ（9・28）式と（9・25）式に与えられている。

$$\Psi_v(x) = N_v H_v(y) e^{-\frac{y^2}{2}} \qquad y = \frac{x}{\alpha}, \qquad \alpha = \left(\frac{\hbar^2}{mk}\right)^{\frac{1}{4}} \qquad (9\cdot28)$$

$$E_v = \left(v + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega, \qquad \omega = \left(\frac{k}{m}\right)^{\frac{1}{2}}, \qquad v = 0,1,2,3\ldots\ldots \qquad (9\cdot25)$$

5月15日，学生番号，氏名

（1） ド・ブローイの関係式と波動関数の境界条件から，箱の中の粒子のエネルギーを求めよ.

（2）調和振動子の振動運動のエネルギーを示し、エネルギー準位間隔，吸収線の間隔，最低エネルギーなどの特徴を説明せよ。

（3）三次元の回転運動のエネルギー準位と多重度を示し、エネルギー準位間隔，吸収線の間隔，最低エネルギーなどの特徴を説明せよ。

（4）本日の授業についての意見，感想，苦情，改善提案などを書いてください.