

生命環境化学特別演習（第5回）

次の固有関数（波動関数）が規格化されているか否かを、積分の式とともに答えよ。

なお、規格化される条件は、角度の方程式については $\int_0^\pi \int_0^{2\pi} |Y_l^m(\theta, \phi)|^2 \sin \theta d\theta d\phi = 1$ を、距離の

方程式については $\int_0^\infty |R_{n,l}(r)|^2 r^2 dr = 1$ を満たす場合となる。

$$1) \quad Y_0^0(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{1}{4\pi}} \quad (l=0, m=0 \text{ のとき})$$

$$2) \quad R_{1,0}(r) = 2 \left(\frac{1}{a_0} \right)^{\frac{3}{2}} \exp\left(-\frac{r}{a_0}\right) \quad (n=1, l=0 \text{ のとき。} a_0 \text{ はボーア半径})$$

なお、 $\int x^2 \exp(-ax) dx = -\frac{1}{a^3} (a^2 x^2 + 2ax + 2) \exp(-ax)$ の関係式を用いてよい。

【解答例】

$$1) \quad \int_0^\pi \int_0^{2\pi} |Y_l^m(\theta, \phi)|^2 \sin \theta d\theta d\phi = 1 \quad \text{の式に} \quad Y_0^0(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{1}{4\pi}} \quad \text{を代入すると、}$$

$$\int_0^\pi \int_0^{2\pi} \left| \sqrt{\frac{1}{4\pi}} \right|^2 \sin \theta d\theta d\phi = \frac{1}{4\pi} \int_0^\pi \sin \theta d\theta \cdot \int_0^{2\pi} d\phi = \frac{1}{4\pi} [-\cos \theta]_0^\pi \cdot [\phi]_0^{2\pi} = \frac{1}{4\pi} \{1 - (-1)\} 2\pi = 1$$

となる。よって、規格化されている。

$$2) \quad \int_0^\infty |R_{n,l}(r)|^2 r^2 dr = 1 \quad \text{の式に} \quad R_{1,0}(r) = 2 \left(\frac{1}{a_0} \right)^{\frac{3}{2}} \exp\left(-\frac{r}{a_0}\right) \quad \text{を代入すると、}$$

$$\int_0^\infty \left| 2 \left(\frac{1}{a_0} \right)^{\frac{3}{2}} \exp\left(-\frac{r}{a_0}\right) \right|^2 r^2 dr = \frac{4}{a_0^3} \int_0^\infty r^2 \exp\left(-\frac{2r}{a_0}\right) dr \quad \text{となる。ここで、}$$

$\int x^2 \exp(-ax) dx = -\frac{1}{a^3} (a^2 x^2 + 2ax + 2) \exp(-ax)$ の関係式を用いて展開すると、（前式に続く）

$$\frac{4}{a_0^3} \int_0^\infty r^2 \exp\left(-\frac{2r}{a_0}\right) dr = \frac{4}{a_0^3} \left[-\frac{a_0^3}{8} \left(\frac{4}{a_0^2} r^2 + \frac{4}{a_0} r + 2 \right) \exp\left(-\frac{2r}{a_0}\right) \right]_0^\infty = \frac{4}{a_0^3} \cdot \left(-\frac{a_0^3}{8} \right) (-2) = 1$$

となる。よって、規格化されている。