

生命環境化学特別演習（第6回）

1s 軌道の電子の「期待値」 $\langle r \rangle$ は、

$$\langle r \rangle = \int r \psi^2(r, \theta, \phi) dx = \int_0^\infty r |R_{1,0}(r)|^2 r^2 dr \cdot \int_0^\pi \int_0^{2\pi} |Y_0^0(\theta, \phi)|^2 \sin \theta d\theta d\phi = \int_0^\infty |R_{1,0}(r)|^2 r^3 dr$$

と導かれることから、

$$R_{1,0}(r) = 2 \left(\frac{1}{a_0} \right)^{\frac{3}{2}} \exp\left(-\frac{r}{a_0}\right) \text{ を用いて、「期待値」 } \langle r \rangle \text{ を、 } a_0 \text{ を用いた簡単な式で示せ。}$$

なお、関係式 $\int_0^\infty x^n \exp(-ax) dx = \frac{n!}{a^{n+1}}$ を用いてよい。

【解答例】 《課題の前の誘導式も含みます》

$$\langle r \rangle = \int r \psi^2(r, \theta, \phi) dx = \int_0^\infty r |R_{1,0}(r)|^2 r^2 dr \cdot \int_0^\pi \int_0^{2\pi} |Y_0^0(\theta, \phi)|^2 \sin \theta d\theta d\phi$$

$$\text{に、 } R_{1,0}(r) = 2 \left(\frac{1}{a_0} \right)^{\frac{3}{2}} \exp\left(-\frac{r}{a_0}\right) \text{ および } Y_0^0(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{1}{4\pi}} \text{ を代入する。}$$

$$\text{うち、角度の項については、} \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \frac{1}{4\pi} \sin \theta d\theta d\phi = \left[\frac{-\cos \theta}{4\pi} \right]_0^\pi [\phi]_0^{2\pi} = -\frac{1}{4\pi}(-1-1)2\pi = 1$$

となることから、 $\langle r \rangle = \int_0^\infty |R_{1,0}(r)|^2 r^3 dr$ と整理することができる。

$$\text{《以降が課題です》} \quad \text{よって、} R_{1,0}(r) = 2 \left(\frac{1}{a_0} \right)^{\frac{3}{2}} \exp\left(-\frac{r}{a_0}\right) \text{ を代入して、}$$

$$\langle r \rangle = \int_0^\infty |R_{1,0}(r)|^2 r^3 dr = \int_0^\infty \left| 2 \left(\frac{1}{a_0} \right)^{\frac{3}{2}} \exp\left(-\frac{r}{a_0}\right) \right|^2 r^3 dr = \frac{4}{a_0^3} \int_0^\infty r^3 \exp\left(-\frac{2}{a_0} r\right) dr$$

$$= \frac{4}{a_0^3} \left\{ \frac{3!}{\left(2/a_0\right)^4} \right\} = \frac{a_0^4}{a_0^3} \frac{4 \cdot 6}{2^4} = \frac{3}{2} a_0 \quad \left(\text{なお、上記の誘導には } \int_0^\infty x^n \exp(-ax) dx = \frac{n!}{a^{n+1}} \text{ を用いて} \right)$$

います。)