

これまでの勉強で、水素原子の解の角度依存部分は球面調和関数で表されることがわかった。球面調和関数は全角運動量が l であるような解は、 $Y_l^{-l}, Y_l^{-l+1}, \dots, Y_l^{+l}$ の $2l+1$ 個であり、これらは角運動量の z 成分が $-l, -l+1, \dots, +l$ となっていて、規格直交化されている。

さて、この基底の取り方を変えてみよう。たとえば、 $l=1$ の場合、 $Y_1^{-1}, Y_1^0, Y_1^{+1}$ ではなく、 $\frac{1}{\sqrt{2}}(Y_1^{-1} \pm Y_1^{+1})$ と Y_1^0 を基底に取り、 $l=2$ の場合は、 $\frac{1}{\sqrt{2}}(Y_2^{-2} \pm Y_2^2)$ 、 $\frac{1}{\sqrt{2}}(Y_2^{-1} \pm Y_2^1)$ 、 Y_2^0 と取る。(注：全体を実数化するようにさらに係数をかける場合がある)。

- 1) 以上の新しい波動関数もそれぞれ規格化・直交化されていることを示せ。
- 2) これらの波動関数の絶対値の自乗をデカルト座標で表し、各自、わかりやすいように図示せよ。ヒント 関数が一定の値をとる局面(等高面)を三次元空間で描けばよい。正解は化学の入門書に図解されている場合が多い。
- 3) $l=1$ の場合の新しい三つの波動関数に電子がすべて詰まった状態の波動関数の絶対値の自乗の和を計算し、等方的(q や ϕ によらない)であることを示せ。同じことを $l=2$ の場合の五つの波動関数についても計算せよ。このような状態(特定の l を持つ波動関数にすべて電子が詰まった状態)を「閉殻」という。閉殻について参考書で調べ、簡潔に述べよ。
- 4) これらの波動関数に対する角運動量の z 成分の期待値を求めよ。

ヒント及びコメント 答えはゼロである。多くの固体中の電子の波動関数はこの新しい基底である。このように電子の軌道角運動量は固体中で消失し、スピン角運動量のみが生き残っている場合が多い。

後藤 (3-335B, gotoo-t@sophia.ac.jp)