

6.17

学習相談

来室者

1 回生 男子 1 名、女子 1 名

質問内容

学生 A

Bohr の理論から始まって、水素原子のエネルギー準位、原子の電子構造、特に n, l, m の量子数の出てくるところがわからない。

学生 B

数学の練習問題で、学生番号から計算される数値を四次元連立方程式の係数または定数に用いて、得られた方程式を解く問題。一応といてみたが正しかどうかわからないので、見て欲しい。

回答内容

学生 A

基本的には、学生のノートを見ながら、以下の要点を確認した。

- (1) 1次元の箱の中の粒子の運動を用いて、ド・ブロイ波の考えを適用すると、量子数 ($n=1,2,3,\dots$) とそれによって決まる不連続なエネルギー (準位) がでてくこと。
- (2) 2次元、3次元と箱の次元を増やすと、量子数は2種、3種と変数の数だけ増えること。
- (3) x -方向の運動量の演算子を $-i\frac{h}{2\pi}\frac{\partial}{\partial x}$ とすると、運動エネルギーは $\frac{p_x^2}{2m} = -\frac{h^2}{8m\pi^2}\frac{\partial^2}{\partial x^2}$ と書けること。3次元では運動エネルギーは $\frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) = -\frac{h^2}{8m\pi^2}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)$ と表わされる。
- (4) 位置エネルギーの演算子はそのままなので、1次元では $V(x)$ 、3次元では $V(x, y, z)$ となる。
- (5) 上記(3)と(4)から全エネルギーの演算子 H (ハミルトニアン) は
$$H = -\frac{h^2}{8m\pi^2}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) + V(x, y, z)$$
 と表わされる。
- (6) 水素原子の電子のように球対称の場を運動している場合、 H の変数は x, y, z から極座標 r, ϑ, φ に変換する。ただし、この変換と波動方程式を解くことは上級生の課題。
- (7) 大切なのは変数が3つなので、基本的に量子数が3種出てくこと。
- (8) それらは主量子数 n 、方位量子数 l 、磁気量子数 m 、の三つで、 n が与えられると、 l は $n-1, n-2, \dots, 0$ の $n-1$ 個の値を、 m は $-l, -l+1, \dots, 0, \dots$

$l-1, l$ の $2l+1$ 個の値をとることができる。

(9) 水素原子では、エネルギーは主量子数で決まる。

$n=1$ $l=0$ の状態を $1s$ 、

$n=2$ $l=0$ の状態を $2s$ 、 $l=1$ の状態を $2p$ 、

$n=3$ $l=0$ の状態を $3s$ 、 $l=1$ の状態を $3p$ 、 $l=2$ の状態を $3d$ 、等々と呼ぶ。

(10) $2p$ 、 $3p$ 、など np の状態には m の値の違いによる三つの状態がある。これらは p_x 、 p_y 、 p_z と書かれることが多い。

(11) $3d$ 、 $4d$ 、など nd には 5 つの異なる状態が、また $4f$ 、 $5f$ 、などには 7 つの状態がある。

(12) 1 つの状態 (一組の n, l, m で指定される) には 2 個の電子を収容することが出来る。

(13) $1s$ には 2 個、 $2p$ には 6 個、 $3d$ には 10 個、 $4f$ には 14 個、という具合になる。

(14) したがって K 殻($n=1$)には 2 個、 L 殻($n=2$)には 8 個、 M 殻($n=3$)には 18 個の電子を収容可能である。

以上

学生 B

連立方程式 $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ が一義的な解を持つためには、 $|A| \neq 0$ でなければならない。学生番号を用いて行列 A の要素の一部を決めることになっているので、それをどのように決めるかで、結果が変わるかもしれない。

いずれにしても、 $|A| \neq 0$ であれば一義的な解が存在し、

もし $|A| = 0$ であれば、解は不定か、または不能である。

したがって、学生番号を用いて決めた行列が正しいとしてその行列式の値を計算することを勧めた。必要があれば次回に答を教えることにした。