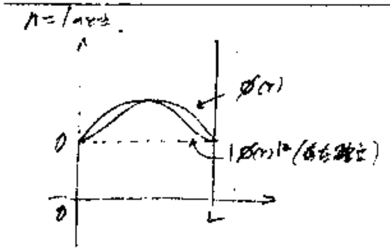
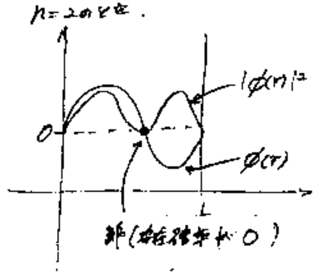




2. 水素原子の量子状態

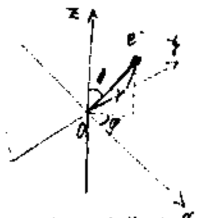
化学における量子状態には
①並進
②回転
③振動
④電子状態
がある。これは量子力学においては、ある系の状態、測定を行ったときに一定値が同時に得られるような物理量の組とその値によって指定される純粋状態といくつかの純粋状態に系が見い出される確率のみが定まる混合状態の2種類に分けられる。

水素原子の場合、シュレディンガー方程式より、

$$\underbrace{\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2-\frac{e^2}{r}\right]}_{\text{ハミルトン演算子}}\phi(r)=\underbrace{E}_{\text{固有値}}\,\underbrace{\phi(r)}_{\text{固有関数}}\qquad \nabla^2=\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

（ラプラスの微分演算子）

水素原子において、陽子の質量と電子の質量比が 1800:1 となるので、原子核を固定したものとして近似する。



左のような座標系において波動関数が以下のようになる。

$$\phi_{nLm}(r,\theta,\varphi)=R_{nL}(r)Y_{Lm}(\theta,\varphi)$$

n … 主量子数（エネルギーを定める）($n=1,2,\cdots$)

L … 軌道角運動量子数 ($L=0,\cdots,n-1$)

m … 磁気量子数（$-L<m<L$ の範囲のすべての整数の個数

よって、安定な定常状態では、$E_n=-\dfrac{2\pi m e^2}{n^2 h^2}$ ($n=1,2,\cdots$) で与えられるエネルギー準位がある。

以上のことから、水素原子の量子状態とエネルギー準位の関係は以下のようになる。