水素原子の基底状態における電子の波動関数は

$$\psi_{n=1,\ell=0,m=0}(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} R_{n=1,\ell=0}(r), \tag{1}$$

$$R_{n=1,\ell=0}(r) \equiv 2\left(\frac{1}{a_{\rm B}}\right)^{3/2} \exp\left(-\frac{r}{a_{\rm B}}\right), \ (a_{\rm B}:\text{ボーア半径}) \tag{2}$$

と表される。

1. $n=1, \ell=0, m=0$ という記号、数字は何を意味するか説明せよ。
2. 基底状態にある電子が $(r, r+dr)$ の間に存在する確率を $P_{n=1,\ell=0,m=0}(r)dr$ とする。すなわち、

$$P_{n=1,\ell=0,m=0}(r)dr = \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\pi} \sin\theta d\theta \cdot |\psi_{n=1,\ell=0,m=0}(\boldsymbol{r})|^2 \cdot r^2 dr \tag{3}$$

   である。このとき、$P_{n=1,\ell=0,m=0}(r)$ を求め、グラフの概略を描け。
3. $P_{n=1,\ell=0,m=0}(r)$ を最大にする半径 r を求めよ。

(解答例)

1. n は主量子数、ℓ は方位量子数（また軌道角運動量の（量子化された）値、m は磁気量子数である。可能な値として、$n = 1, 2, 3, \cdots$、n の 1 つの値に対して、$\ell = 0, 1, 2, \cdots, (n-1)$、また,$\ell$ の 1 つの値に対して、$m = -\ell, -\ell+1, \cdots, -1, 0, 1, 2, \cdots, \ell$ のみが可能である。水素原子における電子のエネルギーは n の値で決まり、最低値は $n = 1$ の場合である。したがって、$n = 1, \ell = 0, m = 0$ は電子の基底状態を指定する量子数の組である。
2.

$$P_{n=1,\ell=0,m=0}(r) = r^2 |R_{n=1,\ell=0}(r)|^2, \tag{4}$$

$$= 4\left(\frac{1}{a_{\rm B}}\right)^3 r^2 \exp\left(-\frac{2r}{a_{\rm B}}\right), \tag{5}$$

$$\tag{6}$$

   （グラフの概略は、今、省略する。各自考えよ。）
3.

$$0 = \frac{dP_{n=1,\ell=0,m=0}(r)}{dr}$$

$$= 8\left(\frac{1}{a_{\rm B}}\right)^3 r \cdot \exp\left(-\frac{2r}{a_{\rm B}}\right) \times \left(1 - \frac{r}{a_{\rm B}}\right),$$

$$\to r = a_{\rm B}. \tag{7}$$