水素類似原子の波動関数

水素類似原子の波動関数をまとめておこう。
全体の形は、

$$\psi_{n,l,m} = R_{n,l}(r) \times Y_{l,\pm m}(\theta,\phi)$$

$$R_{n,l} = -\left\{\frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]^3}\right\}^{1/2}\left(\frac{2Z}{na_0}\right)^{l+3/2} r^l \exp\left(-\frac{Zr}{na_0}\right)L_{n+l}^{2l+1}\left(\frac{2Zr}{na_0}\right)$$

$$Y_{l,\pm m}(\theta,\phi) = \left[\frac{(2l+1)}{4\pi}\frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}\right]^{1/2} P_l^{|m|}(\cos\theta)e^{im\phi}$$

であるが、最初の数個の波動関数を表 1 に示した。
最初の規格化定数の所には、$R_{nl}(r)$ と球面調和関数 $Y_{l,\pm m}(\theta,\phi)$ に含まれる規格化定数を抽出して書いている。

表 1　水素類似原子に対するシュレディンガーの方程式の解

n	l	m	名称	規格化定数	$R_{n,l}(r)$	$Y_{l,\pm m}(\theta,\phi)$
1	0	0	1s	$\frac{1}{\sqrt{\pi}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}$	$\exp(-Zr/a_0)$	1
2	0	0	2s	$\frac{1}{4\sqrt{2\pi}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}$	$\left(2-\frac{Zr}{a_0}\right)\exp(-Zr/2a_0)$	1
2	1	0	$2p_z$	$\frac{1}{4\sqrt{2\pi}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}$	$\frac{Zr}{a_0}\exp(-Zr/2a_0)$	$\cos\theta$
2	1	±1	$2p_x$ $2p_y$	（同じ）		$\sin\theta\cos\phi$ $\sin\theta\sin\phi$

＊表中の $R_{n,l}(r)$、$Y_{l,\pm m}(\theta,\phi)$ の各々の規格化定数は省き、両方をまとめた積を「規格化定数」の欄に記してある。

＊ $a_0 = \dfrac{\varepsilon_0 h^2}{\pi m e^2}$ （ボーア半径）

＊ $\psi_{2px} = \{\psi(2,1,+1) + \psi(2,1,-1)\}/2$,　$\psi_{2py} = \{\psi(2,1,+1) - \psi(2,1,-1)\}/2i$　の形に直して、見やすくしている。

ちなみに、ルジャンドル陪関数（associated Legendre function）$P_l^{|m|}(\cos\theta)$は
$P_0^0(x)=1$、$P_1^0(x)=\cos\theta$、$P_1^1(x)=\sin\theta$、

$P_2{}^0(x)$=(3cos$^2\theta$ - 1)/2、$P_2{}^1(x)$=3cosθsinθ、$P_2{}^2(x)$=3sin$^2\theta$、など

ラゲールの倍多項式$L_{n+l}^{2l+1}(x)$は

$$L_1^1(x) = -1, \quad L_2^1(x) = -2!(2 - x), \quad L_3^3(x) = -3!$$
$$L_3^1(x) = -3!(3 - 3x + x^2/2) \quad L_4^3(x) = -4!(4 - x) \quad L_5^5(x) = -5!$$
など

である。