

Q 1.

陽子 1 個と電子 1 個で構成される系を考えることとする。系の全エネルギー 1) が大きい場合と小さい場合に分けて考えてみる。

(1) 束縛：系の全エネルギーが小さい場合（水素原子）

電子は、陽子の静電ポテンシャルに捕捉されて脱出できない。

(2) 散乱：系の全エネルギーが大きい場合

大きな運動エネルギーをもつ電子は、陽子の静電ポテンシャルの影響を受ける（散乱）が捕捉されることはなく、そのまま通り過ぎていく。

この 2 つ場合について定常状態についての量子力学を適用してみると以下となる。

(1) 束縛：系（水素原子）の全エネルギーは離散的な値しか取れない。

対応して、軌道 (orbit) (以下、単に軌道という) と呼ばれる波動関数が定まる。

(2) 散乱：系の全エネルギーは連続的に変化できる。

波動関数に軌道という概念はない。

まとめると、系の全エネルギーを、低エネルギー側から増加させていくと、水素原子の基底状態から励起状態までは離散的な値しか取れず、電子が陽子の束縛を解かれた（水素原子がイオン化した）高エネルギー側では、連続的な値が許される。なお、全エネルギーが、低エネルギー側では離散的となり、高エネルギー側では連続的となるのは（定常状態についての量子力学の）波動方程式を解く際の境界条件の違いによる。

このように、広い全エネルギー範囲でこの系を考えてみると、1s 軌道についての知識だけでは、全エネルギー最低の状態（基底状態）に加えて、より、大きなエネルギーをもつさまざまな状態を含めて考察の対象とするときには不十分であることが分かるであろう。基底状態においては非占有であった 2s、3s 軌道などについての知識も必要になる。

水素原子 2 個による化学結合（水素分子の生成）は 1s 軌道のみを考えれば説明できるが、水素以外の閉殻構造をもたない原子による化学反応や、これらの原子で構成される分子や結晶の（電子が関わる）物性を考察するときには、各原子の占有軌道のみならず非占有軌道の双方の知識が必須となる。

量子力学などの教科書で「水素原子」の部分だけを勉強するのではなく、まず目次全体を見ること。以上の説明と併せて理解を深めてください。

1) 簡単のために、質量が巨大な陽子は静止したままで、この陽子と電子の間にはクーロン力のみが作用すると仮定する。この仮定のもとでは、系の全エネルギーとは、電子のエネルギー（運動エネルギー＋静電ポテンシャル・エネルギー）とみなせる。さらに、電子が陽子から遠く離れている時は、系の全エネルギーとは電子の運動エネルギーとみなせる。関連して、一度は「二体問題」、「換算質量」について勉強しておくといよい。（竹田 精治）