基礎無機化学

―構造と結合を理論から学ぶ―

章末問題解答の補足

1 章

1.5　電場 E（図 1.6）によるクーロン力 eE を上向き（陽電極側）に受ける．

磁場 B (図 1.7) によるローレンツ力 evB を上向きに受ける．フレミング左手の法則より，力 evB：親指，磁場 B：人差し指，電子の運動 v：中指の方向．あるいは，ベクトル evB は v と B の外積の方向．

ローレンツ力 evB とクーロン力 eE が釣り合うときに，電子は直進する．

3 章

3.1　原子核の周囲を回る電子には電子自身の円運動による遠心力と電子と原子核の間に働くクーロン力が動径方向で釣り合っていることから，質量 m，電荷 $-e$ の電子が電荷 $+e$ の原子核から半径 r の距離を速度 v で円運動していると考えると，以下の式が導かれる．

（遠心力）＝（クーロン力）

$$m \times \frac{v^2}{r} = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r^2} \qquad (1)$$

このとき電子のもつ全エネルギーは

（全エネルギー）＝（円運動のエネルギー）＋（クーロン力の位置エネルギー）　(2)

と表される. 電子の運動エネルギー及び位置エネルギーは, それぞれ $1/2mv^2\,(=\frac{e^2}{8\pi\varepsilon_0 r})$, $-\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}$ であるから，式(1)，(2)より電子のもつ運動エネルギーと位置エネルギーの和は

$$（全エネルギー）=\frac{1}{2}mv^2 - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r} = -\frac{e^2}{8\pi\varepsilon_0 r}$$

となる．

3.2　物体が半径 r の円周上を 1 秒間に f 回転するとすると，1 秒間の移動距離は $2\pi rf$ なので，この物体の速さ v は

$$v=2\pi rf \qquad (1)$$

である．物体の位置ベクトルの先端の移動速度が物体の速度であるから，速度ベクトル $\boldsymbol{v}$ の先端の移動速度が加速度である．したがって，等速円運動の加速度の大きさ a は

$$a=(2\pi f)^2 r \qquad (2)$$

である．ここで，角速度をωとすると，

$$\omega=2\pi f \qquad (3)$$

であるから，加速度ベクトル $\boldsymbol{a}$ は式(2)および(3)より

$$\boldsymbol{a}=\omega^2 r \qquad (4)$$

と表される．

3.3　等速円運動の周期 T は物体が円周上を 1 周する時間であるから

「単位時間あたりの回転数 f」×「周期 1」＝1

$$\therefore \quad Ft=1 \qquad (5)$$

なので，周期 T は単位時間あたりの回転数 f の逆数である．

$$T=1/f \qquad (6)$$

3.2 の式(3)より，$f=\omega/2\pi$ であるから，T は式(6)から

$$T=2\pi/\omega \qquad (7)$$

と表される．

5 章

※5.1～5.5 は村上雅人,『なるほど量子力学Ⅱ』海鳴社などの，数式の誘導が丁寧な量子力学の本が参考になる.

5.1

(5,6) より,

$$\frac{\partial r}{\partial x} = \sin\theta\cos\phi$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial x} = \frac{\cos\theta\cos\phi}{r}$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial x} = -\frac{\sin\phi}{r\sin\theta}$$

となるから，(5,7) より

$$\frac{\partial}{\partial x} = \sin\theta\cos\phi\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos\theta\cos\phi}{r}\frac{\partial}{\partial\theta} - \frac{\sin\phi}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}$$

さらに,

$$\begin{aligned}
\frac{\partial^2}{\partial x^2} = \frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial}{\partial x}\right) &= \left(\sin\theta\cos\phi\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos\theta\cos\phi}{r}\frac{\partial}{\partial\theta} - \frac{\sin\phi}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\right)\cdot \\
&\quad \left(\sin\theta\cos\phi\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos\theta\cos\phi}{r}\frac{\partial}{\partial\theta} - \frac{\sin\phi}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\right) \\
&= \sin^2\theta\cos^2\phi\frac{\partial^2}{\partial r^2} \\
&\quad + \sin\theta\cos\theta\cos^2\phi\frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}\right) - \sin\phi\cos\phi\frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\phi}\right) + \frac{\cos\theta\cos^2\phi}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial r}\right) \\
&\quad + \frac{\cos\theta\cos^2\phi}{r^2}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\cos\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) - \frac{\cos\theta\sin\phi\cos\phi}{r^2}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\right) \\
&\quad - \frac{\sin\phi}{r}\frac{\partial}{\partial\phi}\left(\cos\phi\frac{\partial}{\partial r}\right) - \frac{\sin\phi\cos\theta}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\left(\cos\phi\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{\sin\phi}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\left(\sin\phi\frac{\partial}{\partial\phi}\right)
\end{aligned}$$

同様に，(5,7) より

$$\frac{\partial}{\partial y} = \left(\frac{\partial r}{\partial y}\right)\frac{\partial}{\partial r} + \left(\frac{\partial\theta}{\partial y}\right)\frac{\partial}{\partial y} + \left(\frac{\partial\phi}{\partial y}\right)\frac{\partial}{\partial y} = \sin\theta\sin\phi\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos\theta\sin\phi}{r}\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{\cos\phi}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}$$

∵ (5,6) より

$$2r\frac{\partial r}{\partial y} = 2y$$

$$\frac{\partial r}{\partial y} = \frac{y}{r} = \frac{r\sin\theta\sin\phi}{r} = \sin\theta\sin\phi$$

$$-\sin\theta\frac{\partial\theta}{\partial y} = -\frac{z}{r^2}\frac{\partial r}{\partial y} = \frac{-zy}{r^3}.$$

$$\frac{\partial\theta}{\partial y} = \frac{yz}{r^3\sin\theta} = \frac{r\sin\theta\sin\phi\, r\cos\theta}{r^3\sin\theta} = \frac{\cos\theta\sin\phi}{r}$$

$$\frac{1}{\cos^2\phi}\frac{\partial}{\partial\phi} = \frac{1}{x}$$

$$\frac{\partial\phi}{\partial y} = \frac{\cos^2\phi}{x} = \frac{\cos^2\phi}{r\sin\theta\cos\phi} = \frac{\cos\phi}{r\sin\theta}$$

さらに,

$$\frac{\partial^2}{\partial y^2} = \frac{\partial}{\partial y}\left(\frac{\partial}{\partial y}\right) = \left(\sin\theta\sin\phi\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos\theta\sin\phi}{r}\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{\cos\phi}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\right)\cdot\left(\sin\theta\sin\phi\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos\theta\sin\phi}{r}\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{\cos\phi}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\right)$$

$$= \sin^2\theta\sin^2\phi\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \sin\theta\cos\theta\sin^2\phi\frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \sin\phi\cos\phi\frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\phi}\right)$$

$$+ \frac{\cos\theta\sin^2\phi}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{\cos\theta\sin^2\phi}{r^2}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\cos\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{\cos\theta\sin\phi\cos\phi}{r^2}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\right)$$

$$+ \frac{\cos\phi}{r}\frac{\partial}{\partial\phi}\left(\sin\phi\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{\cos\phi\cos\theta}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\left(\sin\phi\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{\cos\phi}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\left(\cos\phi\frac{\partial}{\partial\phi}\right)$$

(5,6)より,

$$\frac{\partial}{\partial z} = \cos\theta\frac{\partial}{\partial r} - \frac{\sin\theta}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}$$

となるから,

$$\frac{\partial^2}{\partial z^2} = \frac{\partial}{\partial z}\left(\frac{\partial}{\partial z}\right) = \left(\cos\theta\frac{\partial}{\partial r} - \frac{\sin\theta}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}\right)\left(\cos\theta\frac{\partial}{\partial r} - \frac{\sin\theta}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}\right)$$

$$= \cos^2\theta\frac{\partial^2}{\partial r^2} - \sin\theta\cos\theta\frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}\right)$$

$$- \frac{\sin\theta}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\cos\theta\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{\sin\theta}{r^2}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)$$

加えて,項ごとに整理すると,

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} = \sin^2\theta\cos^2\phi\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \sin\theta\cos\theta\cos^2\phi\frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}\right) - \sin\phi\cos\phi\frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\phi}\right)$$

$$+ \frac{\cos\theta\cos^2\phi}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{\cos\theta\cos^2\phi}{r^2}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\cos\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) - \frac{\cos\theta\sin\phi\cos\phi}{r^2}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\right)$$

$$- \frac{\sin\phi}{r}\frac{\partial}{\partial\phi}\left(\cos\phi\frac{\partial}{\partial r}\right) - \frac{\sin\phi\cos\theta}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\left(\cos\phi\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{\sin\phi}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\left(\sin\phi\frac{\partial}{\partial\phi}\right)$$

$$+ \sin^2\theta\sin^2\phi\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \sin\theta\cos\theta\sin^2\phi\frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \sin\phi\cos\phi\frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\phi}\right)$$

$$+ \frac{\cos\theta\sin^2\phi}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{\cos\theta\sin^2\phi}{r^2}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\cos\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{\cos\theta\sin\phi\cos\phi}{r^2}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\right)$$

$$+ \frac{\cos\phi}{r}\frac{\partial}{\partial\phi}\left(\sin\phi\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{\cos\phi\cos\theta}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\left(\sin\phi\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{\cos\phi}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\left(\cos\phi\frac{\partial}{\partial\phi}\right)$$

$$+ \cos^2\theta\frac{\partial^2}{\partial r^2} - \sin\theta\cos\theta\frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}\right) - \frac{\sin\theta}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\cos\theta\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{\sin\theta}{r^2}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)$$

$$= \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos\theta}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}$$

$$= \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}$$

$$\left(\begin{array}{l} \because\ \dfrac{1}{r^2}\dfrac{\partial}{\partial r}\left(r^2\dfrac{\partial}{\partial r}\right) = \dfrac{\partial^2}{\partial r^2} + \dfrac{2}{r}\dfrac{\partial}{\partial r} \\ \dfrac{1}{r^2\sin\theta}\dfrac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\dfrac{\partial}{\partial\theta}\right) = \dfrac{\cos\theta}{r^2\sin\theta}\dfrac{\partial}{\partial\theta} + \dfrac{1}{r^2}\dfrac{\partial^2}{\partial\theta^2} \end{array}\right)$$

5.2

$$\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial \Psi}{\partial r}\right)+\frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\Psi}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2\Psi}{\partial\phi^2}+\frac{8\pi^2 m}{h^2}(E-V)\Psi=0$$

$\Psi(r,\theta,\phi)=R(r)Y(\theta,\phi)$ として、代入すると、偏微分したら、

$$\frac{1}{R}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial R}{\partial r}\right)+\frac{1}{Y\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial Y}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{Y\sin^2\theta}\frac{\partial^2 Y}{\partial\phi^2}+\frac{8\pi^2 m r^2}{h^2}\left(E+\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\right)=0$$

移項して、

$$\underbrace{\frac{1}{R}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial R}{\partial r}\right)+\frac{8\pi^2 m r^2}{h^2}\left(E+\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\right)}_{r\text{についての項}}=\underbrace{-\frac{1}{Y\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial Y}{\partial\theta}\right)-\frac{1}{Y\sin^2\theta}\frac{\partial^2 Y}{\partial\phi^2}}_{\theta,\phi\text{についての項}}$$

5.3

$$-\frac{1}{Y\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial Y}{\partial\theta}\right)-\frac{1}{Y\sin^2\theta}\frac{\partial^2 Y}{\partial\phi^2}=l(l+1)$$

として、$l(l+1)$ を移項して

$$Y(\theta,\phi)=\Theta(\theta)\Phi(\phi)$$

と変数分離する。偏微分すると、

$$\frac{\cos\theta}{\Theta\sin\theta}\frac{\partial\Theta}{\partial\theta}+\frac{1}{\Theta}\frac{\partial^2\Theta}{\partial\theta^2}+\frac{1}{\Phi\sin^2\theta}\frac{\partial^2\Phi}{\partial\phi^2}+l(l+1)=0$$

両辺に $\sin^2\theta$ をかけると、

$$\frac{\sin\theta\cos\theta}{\Theta}\frac{\partial\Theta}{\partial\theta}+\frac{\sin^2\theta}{\Theta}\frac{\partial^2\Theta}{\partial\theta^2}+\frac{1}{\Phi}\frac{\partial^2\Phi}{\partial\phi^2}+l(l+1)\sin^2\theta=0$$

$$\therefore\ \underbrace{\frac{\sin\theta\cos\theta}{\Theta}\frac{\partial\Theta}{\partial\theta}+\frac{\sin^2\theta}{\Theta}\frac{\partial^2\Theta}{\partial\theta^2}+l(l+1)\sin^2\theta}_{\theta\text{についての項}}=\underbrace{-\frac{1}{\Phi}\frac{\partial^2\Phi}{\partial\phi^2}}_{\phi\text{についての項}}\quad(=m^2\text{ とおき解く})$$

5.4

5-2 rについての項より

$$\frac{1}{R}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial R}{\partial r}\right)+\frac{8\pi^2 m r^2}{h^2}\left(E+\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\right)=l(l+1)$$ (全微分とすることができる)

$R=\dfrac{S(r)}{r}$, $-\dfrac{8\pi^2 mE}{h^2}=\kappa^2$, $\dfrac{2\pi me^2}{h^2\varepsilon_0}=\lambda$ とおき、整理すると

$$\frac{d^2S(r)}{dr^2}+\left\{-\kappa^2+\frac{\lambda}{r}-\frac{l(l+1)}{r^2}\right\}S(r)=0$$

$r\to\infty$での極限では

$$\frac{d^2S(r)}{dr^2}-\kappa^2 S(r)=0$$

$S(r)=\chi(r)\exp(-\kappa r)$ の形の解をもつから、代入・整理すると、

$$\frac{d^2\chi(r)}{dr^2}-2\kappa\frac{d\chi(r)}{dr}+\left\{\frac{\lambda}{r}-\frac{l(l+1)}{r^2}\right\}\chi(r)=0$$

$x=2\kappa r$とおくと、級数解 $\chi(x)=\sum_{n=0}^{\infty}a_n x^{n+\tau}$ をもつ次の微分方程式となる

$$\frac{d^2\chi(x)}{dx^2}-\frac{d\chi(x)}{dx}+\left\{\left(\frac{\lambda}{2\kappa}\right)\frac{1}{x}-\frac{l(l+1)}{x^2}\right\}\chi(x)=0$$

解 $\chi(x)=x^{l+1}F(x)$ を仮定し、これに代入、整理して両辺を x^lで割ると、

$$x\frac{d^2F(x)}{dx^2}+[2(l+1)-x]\frac{dF(x)}{dx}+\left\{\frac{\lambda}{2\kappa}-(l+1)\right\}F(x)=0$$

$$\Updownarrow$$

$$x\frac{d^2f(x)}{dx^2}+(k+1-x)\frac{df(x)}{dx}+(m-k)f(x)=0$$ ラゲールの陪微分方程式の形

5.5　乾利成，中原昭次，山内脩，吉川要三郎著，『改訂化学—物質の構造，性質および反応—』，化学同人，p.143 に化学的に重要な結果が示されている．ここで，a_B はボーア半径．

$$\Psi_{1s} = \frac{1}{\sqrt{\pi}}\left(\frac{1}{a_B}\right)^{3/2}\exp\left(\frac{-r}{a_B}\right)$$

$$\Psi_{2s} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}}\left(\frac{1}{a_B}\right)^{3/2}\left(2-\frac{r}{a_B}\right)\exp\left(\frac{-r}{2a_B}\right)$$

$$\Psi_{2p_z} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}}\left(\frac{1}{a_B}\right)^{3/2}\left(\frac{r}{a_B}\right)\exp\left(\frac{-r}{2a_B}\right)\cos\theta$$

$$\Psi_{2p_x} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}}\left(\frac{1}{a_B}\right)^{3/2}\left(\frac{r}{a_B}\right)\exp\left(\frac{-r}{2a_B}\right)\sin\theta\cos\phi$$

$$\Psi_{2p_y} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}}\left(\frac{1}{a_B}\right)^{3/2}\left(\frac{r}{a_B}\right)\exp\left(\frac{-r}{2a_B}\right)\sin\theta\sin\phi$$

$$\Psi_{3s} = \frac{1}{81\sqrt{3\pi}}\left(\frac{1}{a_B}\right)^{3/2}\left(27-18\left(\frac{r}{a_B}\right)+2\left(\frac{r}{a_B}\right)^2\right)\exp\left(\frac{-r}{3a_B}\right)$$

$$\Psi_{3p_z} = \frac{\sqrt{2}}{81\sqrt{\pi}}\left(\frac{1}{a_B}\right)^{3/2}\left(6\left(\frac{r}{a_B}\right)-\left(\frac{r}{a_B}\right)^2\right)\exp\left(\frac{-r}{3a_B}\right)\cos\theta$$

$$\Psi_{3p_x} = \frac{\sqrt{2}}{81\sqrt{\pi}}\left(\frac{1}{a_B}\right)^{3/2}\left(6\left(\frac{r}{a_B}\right)-\left(\frac{r}{a_B}\right)^2\right)\exp\left(\frac{-r}{3a_B}\right)\sin\theta\cos\phi$$

$$\Psi_{3p_y} = \frac{\sqrt{2}}{81\sqrt{\pi}}\left(\frac{1}{a_B}\right)^{3/2}\left(6\left(\frac{r}{a_B}\right)-\left(\frac{r}{a_B}\right)^2\right)\exp\left(\frac{-r}{3a_B}\right)\sin\theta\sin\phi$$

$$\Psi_{3d_{z^2}} = \frac{1}{81\sqrt{6\pi}}\left(\frac{1}{a_B}\right)^{3/2}\left(\frac{r}{a_B}\right)^2\exp\left(\frac{-r}{3a_B}\right)(3\cos^2\theta-1)$$

$$\Psi_{3d_{xz}} = \frac{\sqrt{2}}{81\sqrt{\pi}}\left(\frac{1}{a_B}\right)^{3/2}\left(\frac{r}{a_B}\right)^2\exp\left(\frac{-r}{3a_B}\right)\sin\theta\cos\theta\cos\phi$$

$$\Psi_{3d_{yz}} = \frac{\sqrt{2}}{81\sqrt{\pi}}\left(\frac{1}{a_B}\right)^{3/2}\left(\frac{r}{a_B}\right)^2\exp\left(\frac{-r}{3a_B}\right)\sin\theta\cos\theta\sin\phi$$

$$\Psi_{3d_{x^2-y^2}} = \frac{1}{81\sqrt{2\pi}}\left(\frac{1}{a_B}\right)^{3/2}\left(\frac{r}{a_B}\right)^2\exp\left(\frac{-r}{3a_B}\right)\sin^2\theta\cos 2\phi$$

$$\Psi_{3d_{xy}} = \frac{1}{81\sqrt{2\pi}}\left(\frac{1}{a_B}\right)^{3/2}\left(\frac{r}{a_B}\right)^2\exp\left(\frac{-r}{3a_B}\right)\sin^2\theta\sin 2\phi$$

6章

6.1　$\Psi = \pi^{-1/2} a_B^{-3/2} \exp(-r/a_B)$ より

$$D(r) = 4\pi r^2 |\Psi|^2 = 4\pi\ \pi^{-1} a_B^{-3} r^2 \exp(-2r/a_B) = 4(a_B)^{-3} \mathrm{r}^2 \exp(-2r/a_B).$$

$\mathrm{d}D(r)/\mathrm{d}r = 0$ となる r で $D(r)$は極大値（かつ最大値）をとる．

$$4\pi (a_B)^{-3} \{2\mathrm{r}\exp(-2r/a_B) + r^2(-2/a_B)\exp(-2r/a_B)\} = 0 \text{ より}$$
$$4\pi (a_B)^{-3}\, 2r\{1-1/a_B\} \exp(-2r/a_B) = 0 \qquad \therefore \quad r = a_B$$

だけが意味のある解である．したがって，半径 $r=a_B$ の球形となる．

6.2　$\Psi = A\exp(-r/a_B)$より　　$\Psi^2 = A^2\exp(-2r/a_B)$

規格化条件は$\int_0^{+\infty} \Psi^2 \mathrm{d}r = 1$ だから　　$\int_0^{+\infty} \exp(-2r/a_B)\mathrm{d}r = 1/A^2$
左辺の定積分は　　$\{-a_B/2 \cdot \exp(-2r/a_B)\}_0^{+\infty} = 0-(-a_B/2) = a_B/2$
したがって，$A^2=2/a_B$ となるから　　$A=(2/a_B)^{1/2}$