Κβαντική Φυσική Ι

Ενότητα 32: Επίλυση ακτινικής εξίσωσης του ατόμου του υδρογόνου

Ανδρέας Τερζής

Σχολή Θετικών Επιστημών

Τμήμα Φυσικής

Σκοποί ενότητας

- Σκοπός της ενότητας είναι να ολοκληρώσει την επίλυση της ακτινικής εξίσωσης για το άτομο του υδρογόνου και να δώσει την ολοκληρωμένη μορφή της κυματοσυνάρτησης.

Περιεχόμενα ενότητας

- Επίλυση ακτινικής εξίσωσης
- Η κυματοσυνάρτηση του ατόμου του υδρογόνου

Εξίσωση δυναμοσειράς

- Για να βρούμε τις ιδιοσυναρτήσεις $u_{nl}(r)$ μπορούμε να «προσποιηθούμε» ότι η δυναμοσειρά $f(r)$ δεν γνωρίζουμε ότι είναι πεπερασμένη, όπως αποδείχθηκε στην προηγούμενη ενότητα και να γράψουμε ότι $u(r) = e^{-\gamma r} r^{l+1} f(r)$, όπου $f(r)$ είναι γενικά μια απειροσειρά.
- Αντικαθιστώντας στην εξίσωση $u'' + \left(2E + \frac{2}{r} - \frac{l(l+1)}{r^2}\right) u = 0$ την γενική έκφραση $u(r) = e^{-\gamma r} r^{l+1} f(r)$, καταλήγουμε στην εξίσωση

$$r f'' + 2(l + 1 - \gamma r) f' + 2\big(1 - \gamma(l + 1)\big) f = 0.$$

Συναφή εξίσωση Laguerre

- Πολλαπλασιάζουμε την τελευταία σχέση με $\frac{1}{2\gamma}$ κι έτσι παίρνουμε

$$2\gamma r \frac{d^2 f}{d(2\gamma r)^2} + 2(l+1-\gamma r)\frac{df}{d(2\gamma r)} + \frac{2}{2\gamma}\big(1-\gamma(l+1)\big)f = 0.$$

- Αντικαθιστούμε με $\gamma = \frac{1}{n}$ και $w = 2\gamma r$. Καταλήγουμε στην εξίσωση

$$w\frac{d^2 f}{dw^2} + (2l+2-w)\frac{df}{dw} + \left(\frac{1}{\gamma} - (l+1)\right)f = 0 \Rightarrow$$

$$wf'' + \big((2l+1)+1-w\big)f' + \big(n+l-(2l+1)\big)f = 0.$$

- Η εξίσωση αυτή είναι ουσιαστικά η συναφή εξίσωση Laguerre, δηλ. η εξίσωση της μορφής:

$$wf'' + (N+1-w)f' + (k-N)f = 0.$$

Λύση εξίσωσης Laguerre

- Οι λύσεις είναι τα συναφή πολυώνυμα Laguerre

${L_K}^N(w) = \frac{d^N}{dw^N} L_K(w)$ με $L_K(w) = e^w \frac{d^K}{dw^K}(r^K e^{-w})$. L_K είναι τα πολυώνυμα Laguerre.

- Για την δική μας περίπτωση

$$f(w) = {L_{n+l}}^{2l+1}(w).$$

- Τελικά $u(r) = e^{-\gamma r} r^{l+1} {L_{n+l}}^{2l+1}(2\gamma r)$. Άρα

$$R(r) = \frac{u(r)}{r} \Longrightarrow R_{nl}(r) = N_{nl} r^l e^{-\frac{r}{n}} {L_{n+l}}^{2l+1}\left(\frac{2r}{n}\right).$$

N_{nl} είναι η σταθερά κανονικοποίησης.

Η κυματοσυνάρτηση του ατόμου του υδρογόνου

- Άρα η κυματοσυνάρτηση του ατόμου του υδρογόνου είναι

$$\psi_{nlm}(r,\theta,\varphi) = N_{lm} r^l e^{-\frac{r}{n}} {L_{n+l}}^{2l+1}\left(\frac{2r}{n}\right) Y_{lm}(\theta,\varphi).$$

- Εδώ το r είναι αριθμός. Αν επιθυμούμε να έχει μονάδες, διαιρούμε με r_0.

Η θεμελιώδης και η πρώτη διεγερμένη κατάσταση

- Η θεμελιώδης κατάσταση είναι για $n = 1$. Άρα $l = 0$ και $m = 0$.
- Επομένως $\psi_{100} = R_{10}Y_{00} = 2r_0^{-\frac{3}{2}}e^{-\frac{r}{r_0}}\frac{1}{\sqrt{4\pi}}$.
- Η πρώτη διεγερμένη είναι για $n = 2$. Άρα $l = 0{,}1$ και $m = 0, \pm 1$.
- Επομένως στην πρώτη διεγερμένη αντιστοιχούν τέσσερις καταστάσεις.

$$\psi_{200} = R_{20}Y_{00} = \frac{1}{\sqrt{2r_0{}^3}}(1 - \frac{r}{2r_0})e^{-\frac{r}{2r_0}}\frac{1}{\sqrt{4\pi}}$$

$$\psi_{210} = \mathrm{R}_{20}Y_{10} = \frac{1}{\sqrt{6r_0{}^3}}\frac{r}{2r_0}e^{-\frac{r}{2r_0}}\sqrt{\frac{3}{4\pi}}cos\theta$$

$$\psi_{21\pm1} = R_{21}Y_{1\pm1} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{\pm i\varphi}\frac{\sqrt{3}}{2}sin\theta\frac{1}{2\sqrt{6}r_0{}^{\frac{3}{2}}}\frac{r}{r_0}e^{-\frac{r}{r_0}}e^{-\frac{r}{2r_0}}$$

Φαινόμενο Zeeman

- Όταν εφαρμόζεται εξωτερικό πεδίο, φασματικές γραμμές (όπως της μετάβασης $n = 3 \rightarrow 2$ του ατόμου του υδρογόνου) διαχωρίζονται σε πολλαπλές φασματικές γραμμές.
- Ο διαχωρισμός αποδίδεται στην αλληλεπίδραση του μαγνητικού πεδίου και την μαγνητική διπολική ροπή που σχετίζεται με την στροφορμή. Απουσία μαγνητικού πεδίου, όπως ξέρουμε, η ενέργεια εξαρτάται μόνο από τον κβαντικό αριθμό n και έχουμε εκπομπή ακτινοβολίας σ’ ένα μοναδικό μήκος κύματος κάθε φορά.

Τέλος Ενότητας

Χρηματοδότηση

- Το παρόν εκπαιδευτικό υλικό έχει αναπτυχθεί στο πλαίσιο του εκπαιδευτικού έργου του διδάσκοντα.
- Το έργο «**Ανοικτά Ακαδημαϊκά Μαθήματα στο Πανεπιστήμιο Αθηνών**» έχει χρηματοδοτήσει μόνο την αναδιαμόρφωση του εκπαιδευτικού υλικού.
- Το έργο υλοποιείται στο πλαίσιο του Επιχειρησιακού Προγράμματος «Εκπαίδευση και Δια Βίου Μάθηση» και συγχρηματοδοτείται από την Ευρωπαϊκή Ένωση (Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο) και από εθνικούς πόρους.

Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Σημείωμα Αναφοράς

Copyright Πανεπιστήμιο Πατρών,Ανδρέας Τερζής ,2014. Ανδρέας Τερζής . «Κβαντική Φυσική Ι. Επίλυση της ακτινικής εξίσωσης του ατόμου του υδρογόνου». Έκδοση: 1.0. Πάτρα 2014. Διαθέσιμο από τη δικτυακή διεύθυνση: https://eclass.upatras.gr/courses/PHY1957/

Σημείωμα Αδειοδότησης