

ΕΠΙΛΥΣΗ ΑΚΤΙΝΙΚΗΣ ΕΞΙΣΩΣΗΣ ΑΤΟΜΟΥ ΥΔΡΟΓΟΝΟΥ

Η εξίσωση είναι της μορφής $u'' + (ZE + \frac{Z}{r} - \frac{E(r+1)}{r^2})u = 0$ με $E < 0$ για θεμελιώδη κατάσταση

Αρχικά (όπως και στον κερμικό τελετωτή) εξετάζουμε την μορφή της λύσης για πολύ μεγάλο r ($r \rightarrow \infty$). Σε αυτή την περίπτωση η ακτινική διαφορική εξίσωση παίρνει την μορφή $u'' + ZE u = 0$, καθώς $\frac{Z}{r} \rightarrow 0$ και αφού $E < 0$ θέτουμε $ZE = -\chi^2 \rightarrow u'' - \chi^2 u = 0$ με λύσεις $e^{\pm \chi r}$ και αποδεκτή λύση την $e^{-\chi r}$ καθώς θα πρέπει $u(r \rightarrow \infty) \rightarrow 0$.

Η ακτινική αυτή λύση μας οδηγεί στο να γράψουμε για την συνολική λύση (όπως είδαμε και στον κερμικό τελετωτή) $u(r) = e^{-\chi r} f(r)$.

Οπότε $u' = -\chi e^{-\chi r} f + e^{-\chi r} f'$ και $u'' = \chi^2 e^{-\chi r} f - 2\chi e^{-\chi r} f' + e^{-\chi r} f''$ και η $\textcircled{1}$ γίνεται (αγνοώντας το κοινό παράγοντα $e^{-\chi r}$), $f'' - 2\chi f' + \chi^2 f + \frac{Z}{r} f - \frac{E(r+1)}{r^2} f = 0$

Αλλάζει έχουμε την εξίσωση: $f'' - 2\chi f' + \frac{Z}{r} f - \frac{E(r+1)}{r^2} f = 0$.

Μπορούμε να πάρουμε πολύ πληροφορία από την μελέτη της διαχρονικής αντιστάσης των οριακών περιπτώσεων, δηλαδή για $r \rightarrow 0$ και $r \rightarrow \infty$.

(α) $r \rightarrow \infty$. Θεωρούμε πολύ μεγάλο r λύση για την f με μέγεθος $\propto r^4$ θα "επιβιώσουν" οι όροι $-2\chi f' + \frac{Z}{r} f = -2\chi 4r^3 + 2r^4 = 0 \rightarrow -2\chi + 2 = 0$

άρα $\chi = \frac{1}{4} \Rightarrow \chi^2 = -ZE = \frac{1}{4r^2} \rightarrow E = -\frac{1}{4r^2}$ όπου $r=1, 2, \dots$ κύριος (πρωτεύων) κβαντικός αριθμός

Μη ξεχνάμε ότι το E είναι $\frac{E}{E_0} = -\frac{1}{4r^2} \rightarrow E = E_0 / 4r^2$.

Αλλάζει από την "συμπεριφορά" του f για πολύ r δείχνει τις ιδιοτιμές της ενέργειας $E = -\frac{E_0}{4r^2} = -\frac{mc^2}{2r^2} \cdot \frac{1}{4} = -\frac{13.6}{r^2} \text{ eV}$.

(β) $r \rightarrow 0$. Θεωρούμε ότι η πολυωνομική συνάρτηση έχει "έλ+λυστο" όρο με μικρότερη δύναμη του r . Τότε από την διαφορική εξίσωση κρατάμε τους όρους $f'' - \frac{E(r+1)}{r^2} f = 5(5-1)r^{-2} - E(r+1)r^{-2} = 0 \rightarrow 5(5-1) = E(r+1)$ και λύσει $r^2 = r+1$, $r = -1$ (μη αποδεκτή λόγω $f(r \rightarrow 0) \rightarrow \infty$!)

Από την διερεύνηση αυτή καταλαβαίνουμε ότι το $f(r)$ είναι ένα πολυώνυμο της μορφής $f(r) = a_{2l+1} r^{2l+1} + a_{2l+2} r^{2l+2} + \dots + a_0 r^0$

Προφανώς $l+1 \leq r \rightarrow \boxed{l \leq r-1}$ που είναι ένας βασικός περιορισμός με- r του r .

Για να βρούμε τις ιδιοσυμπεριφορές $u_{nl}(r)$ (θα εφευρεθεί από r και l), μπορούμε να "προσπονηθούμε" ότι δεν γινώσκουμε (όπως αποδείχθηκε στις οριακές περιπτώσεις) ότι η συνάρτησή είναι πεπερασμένη και να γράψουμε ότι $u(r) = e^{-\chi r} r^l f(r)$ όπου $f(r)$ έχει $2l+1$ μη-μηδενικά. Τότε η $\textcircled{1}$ παίρνει την μορφή $f'' + \frac{2(l+1-\chi r)}{r} f' + \frac{Z(1-\chi(r+1))}{r^2} f = 0$ παρατηρώντας το u δύο φορές και αγνοώντας κάποιους όρους $\{ \chi^2 = -ZE \}$

$$r f'' + 2(l+1-\chi r) f' + Z(1-\chi(r+1)) f = 0 \quad \textcircled{2}$$

Αναζητούμε για την $f(r)$ "πολυωνομική" (απορροστική), δηλαδή $f(r) \neq 0$ (κάνει $r \rightarrow \infty$) Αντικαθιστώντας τον f και f' στην $\textcircled{2}$ βρίσκουμε την αναδρομική σχέση

$$\frac{b_k}{b_{k+1}} = \frac{Z[\chi(k+l)-1]}{k(k+l+1)}$$

Ο αναδρομικός αυτός τύπος είναι $\frac{b_k}{b_{k+1}} \rightarrow \frac{Z\chi}{k}$ καθώς $\frac{b_k}{b_{k+1}} = \frac{Z\chi}{k}$ ανεξάρτητα των εμβόλων $e^{\pm \chi r}$, αλλ' αυτή κληρονομείται για $r \rightarrow \infty$. Άρα η κληρονομιά $f(r)$ πρέπει να είναι να συγκλίνει.

Αυτά αντιστοιχούν σε $b_{N+1} = 0 \rightarrow \chi(N+1+l)-1 = 0 \rightarrow \chi = 1/(N+l+1)$ που δεν είναι άλλος από τον πρωτεύοντα κβαντικό αριθμό n (ή $N+l+1$)

* καθώς $e^{\pm \chi r} = \sum (Z\chi)^k / k! \Rightarrow \frac{b_k}{b_{k+1}} = \frac{(Z\chi)^k / k!}{(Z\chi)^{k+1} / (k+1)!} = \frac{Z\chi}{k+1}$

Αν υποθέσουμε με $\frac{1}{z\gamma}$ που \otimes , βρίσκουμε $(z\gamma r) \frac{d^2 f}{d(z\gamma r)^2} + (z\ell + z - z\gamma r) \frac{df}{d(z\gamma r)} + \frac{z}{z\gamma} (1 - \gamma(\ell+1)) f = 0 \rightarrow$

$$(w = z\gamma r) w \frac{d^2 f}{dw^2} + (z\ell + z - w) \frac{df}{dw} + \left(\frac{1}{\gamma} - (\ell+1)\right) f = 0 \quad (\text{αυτοκαθιστώμετο } \frac{1}{\gamma} = \eta) \rightarrow$$

$$w f'' + ((z\ell+1) + 1 - w) f' + (\eta + \ell - (z\ell+1)) f = 0 \quad \oplus$$

Η εξίσωση αυτή δεν είναι άλλη από την συνηθισμένη εξίσωση Laguerre, διηλεκτική της εξίσωσης της μορφής:

$$w f'' + (N+1-w) f' + (k-N) f = 0 \quad \square$$

Με λύσεις τα συνηθισμένα πολυώνυμα Laguerre, τα οποία επιτυγχάνονται αν $(\text{τα } L_k^N(w))$

$$L_k^N(w) = \frac{d^N}{dw^N} L_k(w) \quad \text{με} \quad L_k(w) = e^w \frac{d^k}{dw^k} (e^{-w}), \quad \text{με } L_k \text{ τα πολυώνυμα Laguerre.}$$

Καταγράφουμε μερικές παραδείγματα, που προκύπτουν από αρχή ετερογενή του η-φαινομένου

$$\text{πάλιν: } L_0=1, L_1=1-w, L_2=2-4w+w^2, L_3=6-18w+9w^2-w^3$$

$$L_1^1=-1, L_2^1=-4+2w, L_3^1=2, L_1^2=-18+18w-3w^2, L_2^2=18-6w, L_3^2=-6.$$

Συγκρίνοντας την \oplus με την \square καταλαβαίνουμε ότι

$$f(w) = L_{\eta+\ell}^{z\ell+1}(w).$$

Έτσι έχουμε τελικά $u(r) = e^{-\gamma r} r^{\ell+1} L_{\eta+\ell}^{z\ell+1}(z\gamma r).$

$$\text{και καθώς } u(r) = r R(r) \rightarrow R(r) = \frac{u(r)}{r} \rightarrow R_{\eta\ell}(r) = N_{\eta\ell} \cdot r^{\ell} \cdot e^{-\gamma r} \cdot L_{\eta+\ell}^{z\ell+1}(z\gamma r)$$

σταθερά ομαλοποίησης. *

Δεν πρέπει να ξεχνάμε ότι το r είναι r/r_0 , όπου r_0 η ακτίνα του βολφ.

Έτσι καταλήγουμε ότι η κυματοσυνάρτηση για το άτομο του H είναι

$$\Psi_{\eta\ell m}(r, \theta, \phi) = N_{\eta\ell m} \cdot r^{\ell} \cdot e^{-\gamma r} \cdot L_{\eta+\ell}^{z\ell+1}(z\gamma r) \cdot Y_{\ell}^m(\theta, \phi)$$

ΑΣΚΗΣΗ. Να βρεθεί η κυματοσυνάρτηση (δηλαδή οι ιδιοκαταστάσεις της ενέργειας)

(α) το άτομο του υδρογόνου (αλλάζει γ)

(β) τα υδρογονοειδή (αλλάζει γ και το r_0 και E_0 !)

* Η ομαλοποίηση $R_{\eta\ell}$ {δηλαδή αυτή για την οποία ισχύει $\int_0^\infty R_{\eta\ell}^2(r) dr = 1$ }

$$\text{δίνει η } R_{\eta\ell}(r) = - \left(\frac{2}{\eta r_0}\right)^{1/2} \sqrt{\frac{(\eta-\ell-1)!}{2\eta \Gamma(\eta+\ell)!}} \left(\frac{z\gamma}{\eta r_0}\right)^{\ell} e^{-\gamma r} L_{\eta+\ell}^{z\ell+1}\left(\frac{z\gamma r}{\eta r_0}\right).$$

Η γενική μορφή της κυματοσυνάρτησης είναι ένας γινόμενο συνδυασμού

$$\text{δηλαδή } \Psi(r, \theta, \phi) = \sum_{\eta, \ell, m} c_{\eta\ell m} \Psi_{\eta\ell m}(r, \theta, \phi)$$

με $|c_{\eta\ell m}|^2$ η πιθανότητα να έχουμε την ιδιοκατάσταση $\eta\ell m$ με ενέργεια $E_{\eta} = -\frac{E_0}{2\eta^2}$, ιδιοτιμή ℓ^2 της L^2 και ιδιοτιμή ℓ_z της L_z .

Η αντίστοιχη χρονοετερογενής κυματοσυνάρτηση είναι

$$\Psi(r, \theta, \phi, t) = \sum_{\eta, \ell, m} c_{\eta\ell m} \Psi_{\eta\ell m}(r, \theta, \phi) e^{-E_{\eta} t / \hbar}$$

Η ιδιοκατασταση του ατόμου του H, χαρακτηρίζονται από το η (εμφάνιση (ισο με n^2), όπως είναι και αναμενόμενο λόγω της μέτρησης συμπεριφοράς του μορίου (βλ. βιβλίο Τραχιά).