

# Hidrogén atom - Coulomb potenciál

A pozitív proton és a negatív elektron közötti potenciális energia:

$$V(r) = -\frac{ke^2}{r}$$

Az elektron az egyetlen proton által alkotott mozdulatlanak tekintett pontszerű atommag által létrehozott elektromos térben mozog.

Az időtől független Schrödinger egyenlet három dimenzióban:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0}\Delta\psi + V(x, y, z)\psi = E\psi$$

Az egyenletet megoldva kaphatjuk meg az elektron energia sajátértékeit, és a hozzájuk tartozó sajátfüggvényeket, amelyek az elektron tartózkodási valószínűségéről adnak információt a különböző kvantumállapotokban.

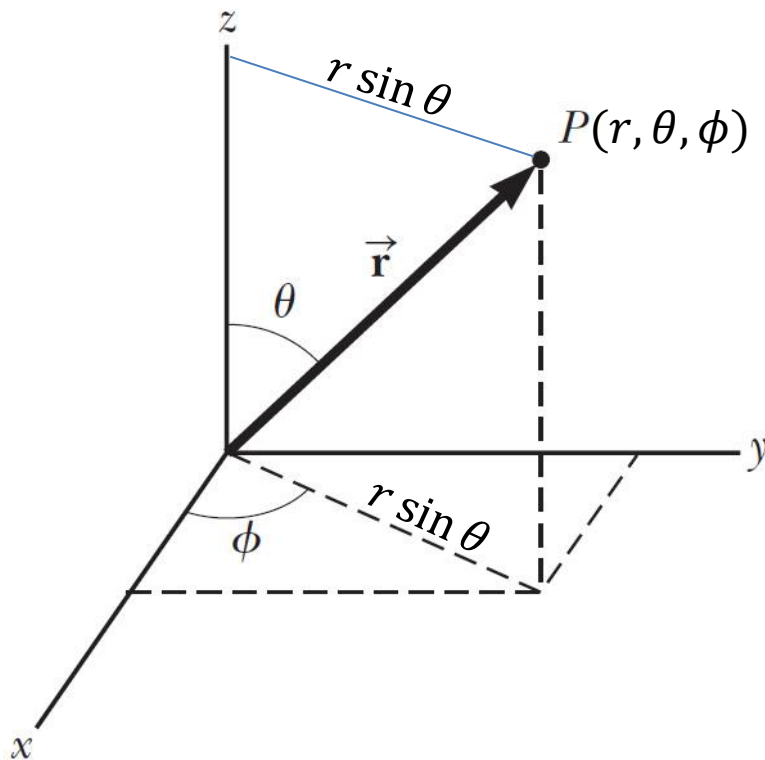
A Coulomb potenciált behelyettesítve:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0}\Delta\psi - \frac{ke^2}{r}\psi = E\psi$$

$$\Delta\psi + \frac{2m_0}{\hbar^2}\left(E + \frac{ke^2}{r}\right)\psi = 0 \quad r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$$

# Gömbi polár koordináták

Mivel a potenciális energia csak a távolságtól függ (gömbszimmetrikus), érdemes áttérni a gömbi polár koordinátákra:



$$\begin{aligned}x &= r \sin \theta \cos \phi \\y &= r \sin \theta \sin \phi \\z &= r \cos \theta\end{aligned}$$

$$r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$$

$$\sin \theta = \frac{\sqrt{x^2 + y^2}}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}}$$

$$\operatorname{tg} \phi = \frac{y}{x}$$

Például:

$$\frac{\partial \psi}{\partial x} = \frac{\partial \psi}{\partial r} \frac{\partial r}{\partial x} + \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \frac{\partial \theta}{\partial x} + \frac{\partial \psi}{\partial \phi} \frac{\partial \phi}{\partial x}$$

A Laplace-operátor:

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

# Hidrogén atom sajátfüggvényei

Az időtől független Schrödinger-egyenlet tehát:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial \psi}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \left( \frac{\partial^2 \psi}{\partial \theta^2} + \operatorname{ctg} \theta \frac{\partial \psi}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \phi^2} \right) + \frac{2m_0}{\hbar^2} \left( E + \frac{ke^2}{r} \right) \psi = 0$$

Mivel a potenciális energia csak az  $r$  távolságtól függ, a sajátfüggvény felbontható  $r$ -től és a  $\theta$ ,  $\phi$  szögektől függő függvények szorzatára:

$$\psi(r, \theta, \phi) = R(r)Y(\theta, \phi)$$

A  $Y(\theta, \phi)$  szögektől függő részt a gömbfüggvények adják:

$$Y_l^m(\theta, \phi) = \sin^{|m|} \theta P_l^m(\cos \theta) e^{im\phi} \quad P_l^m(\cos \theta): \text{ módosított Legendre-polinomok}$$
$$P_l^0(\cos \theta) = P_l(\cos \theta): \text{ Legendre-polinomok}$$

Az  $r$ -től függő rész:

$$R(\xi) = R_{n,l}(\xi) = e^{-\frac{\xi}{2}} \xi^l L_{n+l}^{(2l+1)}(\xi) \quad \text{ahol} \quad \xi = 2 \frac{r}{r_0} \quad \text{és} \quad r_0^2 = -\frac{\hbar^2}{2m_0 E} \quad (E < 0)$$

$L_{n+l}^{(2l+1)}(\xi)$ : az  $(n + l)$ -edik Laguerre-polinom  $(2l + 1)$ -edik deriváltja

Tehát a sajátfüggvények:  $\psi_{nlm} = N_{nlm} e^{-\frac{\xi}{2}} \xi^l L_{n+l}^{(2l+1)}(\xi) \sin^{|m|} \theta P_l^m(\cos \theta) e^{im\phi}$

# Polinomok

Legendre polinomok:  $P_l(\cos \theta)$

$$P_0 = 1$$

$$P_1 = \cos \theta$$

$$P_2 = \frac{1}{2}(3\cos^2\theta - 1)$$

Laguerre-polinomok:  $L_n(\xi)$

$$L_0 = 1$$

$$L_1 = -\xi + 1$$

$$L_2 = \frac{1}{2}(\xi^2 - 4\xi + 2)$$

$$L_3 = \frac{1}{6}(-\xi^3 + 9\xi^2 - 18\xi + 6)$$

Módosított Legendre-polinomok:  $P_l^m(\cos \theta)$

$$P_0^0 = 1 \quad P_1^{-1} = \frac{1}{2}\sqrt{1 - \cos^2\theta} = \frac{1}{2}\sin \theta$$

$$P_1^0 = \cos \theta$$

$$P_1^1 = -\sqrt{1 - \cos^2\theta} = -\sin \theta$$

$$P_2^{-2} = \frac{1}{8}\sin^2\theta$$

$$P_2^{-1} = \frac{1}{2}\cos \theta \sin \theta$$

$$P_2^0 = \frac{1}{2}(3\cos^2\theta - 1)$$

$$P_2^1 = -3\cos \theta \sqrt{1 - \cos^2\theta} = -3\cos \theta \sin \theta$$

$$P_2^2 = 3(1 - \cos^2\theta) = 3\sin^2\theta$$

$$(m = -l, \dots, l)$$

# Kvantumszámok és energia sajátértékek

A sajátfüggvény általános megoldása:

$$\psi_{nlm} = N_{nlm} e^{-\frac{\xi}{2}} \xi^l L_{n+l}^{(2l+1)}(\xi) \sin^{|m|} \theta P_l^m(\cos \theta) e^{im\phi}$$

Ebben az  $n$ ,  $l$  és  $m$  egész számok a kvantumszámok.

Az energia sajátértékek csak az  $n$  **főkvantumszámtól** függenek, és a Bohr-modell által megjósolt értékeket adják. Ezúttal azonban nincs szükség semmilyen feltételezésre, és tisztán kvantummechanikai számítás szolgáltatja természetesen az eredményt:

$$E_n = -\frac{m_0 e^4 k^2}{2\hbar^2 n^2} = -\frac{E^*}{n^2} \quad \text{ahol} \quad E^* = \frac{m_0 e^4 k^2}{2\hbar^2} = 2,176 \cdot 10^{-18} \text{ J} = 13,6 \text{ eV}$$

Az  $l$  a **mellékkvantumszám**, amelynek értéke:  $l = 0, 1, \dots, n - 1$  lehet ( $n$  féle érték).

Az  $m$  a **mágneses kvantumszám**, amely a  $-l, -l + 1, \dots, -1, 0, 1, \dots, l - 1, l$  értékeket veheti fel, amely  $(2l + 1)$  féle értéket jelent.

Ez azt jelenti, hogy egy  $E_n$  sajátértékhez több lineárisan független sajátfüggvény tartozik, tehát az energia sajátértékek a hidrogén atomban elfajultak.

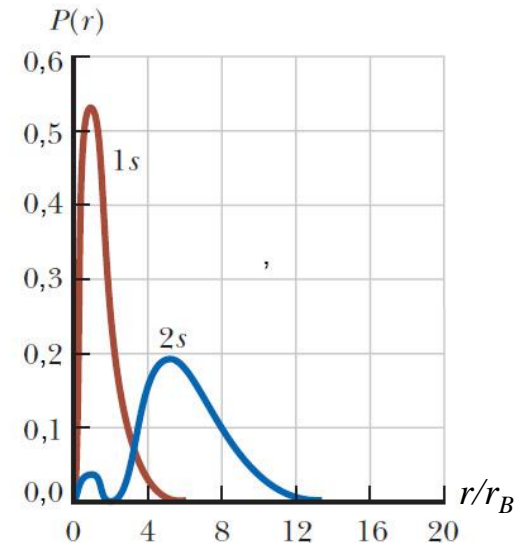
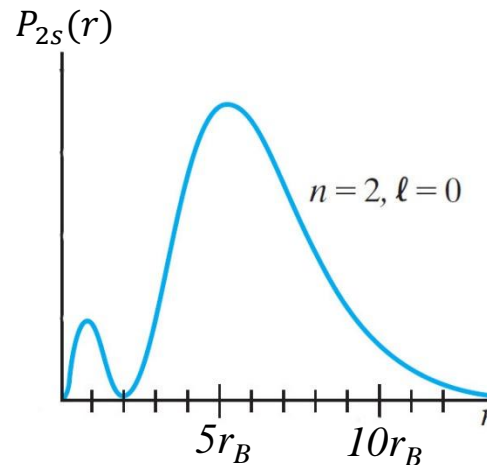
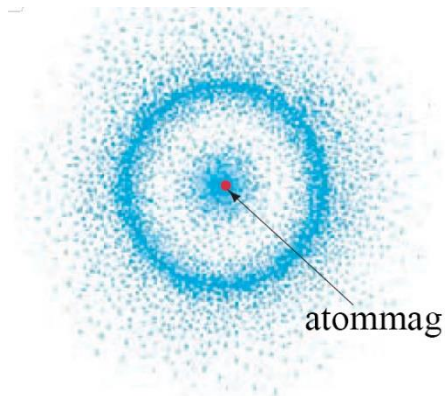
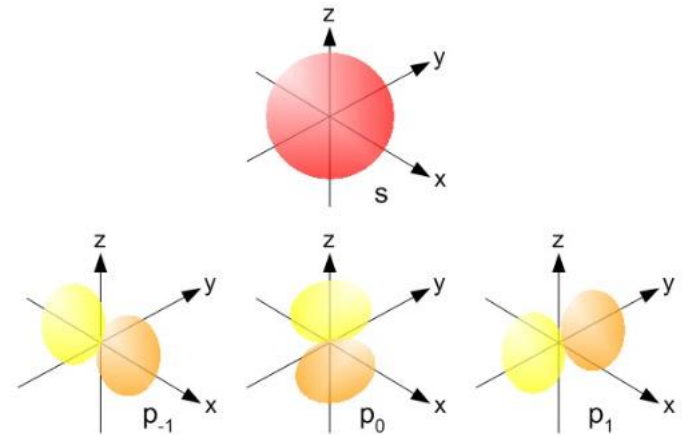
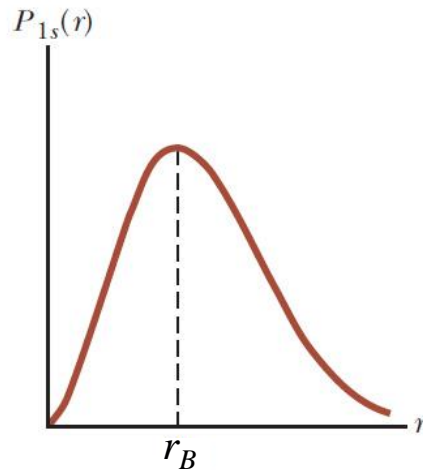
Az elfajulás mértéke, tehát a sajátfüggvények száma adott  $n$  esetén:

$$\sum_{l=0}^{n-1} (2l + 1) = \sum_{l=1}^n (2l - 1) = n^2$$

## Példa:

Az általános sajátfüggvényt és a megfelelő polinomokat használva írja fel az alábbi sajátfüggvényeket 1-re normalizált formájukban! A sajátfüggvényeket  $r$  függvényében írja fel, és használja a hidrogén alapállapotához ( $n = 1$ ) tartozó  $r_B$  Bohr-sugarat!

- a)  $\psi_{100}$  (1s állapot)
- b)  $\psi_{200}$  (2s állapot)
- c)  $\psi_{210}$  (2p<sub>0</sub> állapot)



## Házi feladat 8:

1. Határozza meg, hogy mely távolságban található az elektron a legnagyobb valószínűséggel a hidrogén alapállapotában!
2. Mekkora a valószínűsége annak, hogy a hidrogén elektronját annak alapállapotában a kétszeres Bohr-sugáron belül találjuk?

