

A hidrogén atom

2020. november 26.

A klasszikus fizikában a perdület: $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$. Kvantummechanikában a dinamikai mennyiségeket az operátoraikkal helyettesítjük:

$$\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$$
$$L_x = yp_z - zp_y, \quad L_y = zp_x - xp_z, \quad L_z = xp_y - yp_x$$

Ha bevezetjük az ϵ_{ijk} Levi-Civita szimbólumot:

$$L_i = \sum_{j,k=1}^3 \epsilon_{ijk} r_j p_k$$

A Levi-Civita szimbólum tulajdonságai:

- Ha bármely két indexe megegyezik, akkor az értéke nulla.
- $\epsilon_{123} = 1$ és az 123 ciklikus permutációra: 123, 231, 312 értéke egy, más permutációkra értéke -1.

Perdület operátor

A perdület nagyságát a perdület négyzet operátor jellemzi: $\mathbf{L}^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2$.
Mi lesz a perdület operátor komponenseinek a felcserélési relációi?

$$\begin{aligned}[L_x, L_y] &= [yp_z - zp_y, zp_x - xp_z] = [yp_z, zp_x] - [yp_z, xp_z] - [zp_y, zp_x] + [zp_y, xp_z] \\&= [yp_z, z]p_x + z[yp_z, p_x] - [yp_z, x]p_z - x[yp_z, p_z] \\&\quad - [zp_y, z]p_x - z[zp_y, p_x] + [zp_y, x]p_z + x[zp_y, p_z] \\&= [yp_z, z]p_x + x[zp_y, p_z] = y \underbrace{[p_z, z]}_{\frac{\hbar}{i}} p_x + x \underbrace{[z, p_z]}_{-\frac{\hbar}{i}} p_y = -i\hbar y p_x + i\hbar x p_y = i\hbar L_z\end{aligned}$$

Hasonlóan járhatunk el a többi komponens esetén is:

$$[L_i, L_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} L_k$$

A perdület operátor komponensei nem felcserélhetőek $\Rightarrow$ nem lehet közös sajátállapot rendszerük!

$$[\mathbf{L}^2, L_j] = \sum_{i=1}^3 [L_i^2, L_j] = \sum_{i=1}^3 (L_i [L_i, L_j] + [L_i, L_j] L_i) = \sum_{i=1}^3 i\hbar \epsilon_{ijk} (L_i L_k + L_k L_i) = 0$$

Tehát az $\mathbf{L}^2$ operátor a perdület operátor minden komponensével felcserélhető!

Perdület operátor

Perdület operátor

$$\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p} , \quad \mathbf{L}^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2 , \quad [L_i, L_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}L_k , \quad [\mathbf{L}^2, L_i] = 0$$

Az $\mathbf{L}^2$ és L_z operátorok sajátállapotai:

Az L_z és $\mathbf{L}^2$ operátorok gömbi koordinátákkal:

$$L_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi} , \quad \mathbf{L}^2 = \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial f}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 f}{\partial \varphi^2}$$

Az L_z operátor sajátállapotai:

$$L_z \psi_m = \hbar m \psi_m , \quad \psi = e^{im\varphi}$$

Az $\mathbf{L}^2$ operátor és L_z operátor közös sajátállapotai a gömbfüggvények:

$$\mathbf{L}^2 Y_l^m(\vartheta, \varphi) = \hbar^2 l(l+1) Y_l^m(\vartheta, \varphi)$$

$$L_z Y_l^m(\vartheta, \varphi) = \hbar m Y_l^m(\vartheta, \varphi) , \quad l = 0, 1, 2, \dots, m = -l, \dots, l$$

Centrális erőter esetén a potenciális energia csak a centrumtól mért távolságtól függ.

$$V(\mathbf{r}) = V(r)$$

Az erő a potenciális energia negatív gradiense:

$$\mathbf{F} = -\nabla V(r) = -\frac{dV}{dr} \nabla r = -\frac{\mathbf{r}}{r} \frac{dV}{dr} ,$$

vagyis vonzó centrum esetén az erő mindig a centrum felé mutat. Centrális erőter esetén a perdület mozgásállandó lesz. Kvantummechanikában:

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + v(r) , \quad [H, L_i] = 0 , \quad [H, \mathbf{L}^2] = 0$$

A Hamilton operátornak az $\mathbf{L}^2$ és L_z operátoroknak közös sajátállapotai vannak. Gömbi koordinátákban a sajátállapotokat a következő alakban kereshetjük:

$$\psi_{nlm}(r, \vartheta, \varphi) = R_{nl}(r) Y_l^m(\vartheta, \varphi)$$

ahol R_{nl} radiális függvény.

A Schrödinger egyenlet centrális erőterben

A $\mathbf{p}^2$ operátor a Laplace operátorral kapcsolatos:

$$\mathbf{p}^2 = -\hbar^2 \Delta$$

A Laplace operátor gömbi koordináta rendszerben:

$$\begin{aligned}\mathbf{p}^2 f &= -\hbar^2 \left(\frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} (rf) + \frac{1}{r^2} \left(\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial f}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 f}{\partial \varphi^2} \right) \right) \\ &= -\hbar^2 \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} (rf) + \frac{\mathbf{L}^2}{r^2} f\end{aligned}$$

A Schrödinger egyenlet a következő lesz:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} (r\psi_{nlm}) + \frac{\mathbf{L}^2}{r^2} \psi_{nlm} + V(r)\psi_{nlm} = E_{nl}\psi_{nlm}$$

Helyettesítsük be $\psi_{nlm}(r, \vartheta, \varphi) = R_{nl}(r)Y_l^m(\vartheta, \varphi)$ alakját:

Radiális Schrödinger egyenlet

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} (rR_{nl}(r)) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} R_{nl}(r) + V(r)R_{nl}(r) = E_{nl}R_{nl}(r)$$

A hidrogén atom

A potenciális energia hidrogén atom esetén: $V(r) = -\frac{ke^2}{r}$, ahol e az elemi töltés. A radiális Schrödinger egyenlet:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r R_{nl}(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} R_{nl}(r) - \frac{ke^2}{r} R_{nl}(r) = E_{nl} R_{nl}(r)$$

Keressünk hosszúság és energia skálát. A jellemző fizikai állandók:

Coulomb konstans:	$k = 9 \times 10^9 \text{ Nm}^2/\text{C}^2$	Planck állandó:	$\hbar = 6.626 \times 10^{-34} \text{ Js}$
elemi töltés:	$e = 1.6 \times 10^{-19} \text{ C}$	elektron tömege:	$m = 9.109 \times 10^{-31} \text{ kg}$

Használjunk elemi mértékegységeket: m, kg, C, s

$$[k] = \text{Nm}^2/\text{C}^2 = \frac{\text{kgm}^3}{\text{s}^2\text{C}^2}, \quad [\hbar] = \frac{\text{kgm}^2}{\text{s}}$$

Hosszúság dimenziójú mennyiség:

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{ke^2m} = 0.529 \times 10^{-10} \text{ m}, \quad \text{mértékegység: } \frac{\frac{\text{kg}^2\text{m}^4}{\text{s}^2}}{\frac{\text{kgm}^3}{\text{s}^2\text{C}^2} \text{C}^2 \text{kg}} = \text{m}$$

Energia egység:

$$E_0 = \frac{ke^2}{a_0} = 27.2 \text{ eV} = 1 \text{ Hartree} = 2 \text{ Rydberg}$$

A hidrogén atom

A radiális Schrödinger egyenlet, ha a hosszúságot a_0 , az energiát pedig E_0 egységekben, u.n. atomi egységekben mérjük:

$$-\frac{1}{2} \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r R_{nl}(r) + \frac{l(l+1)}{2r^2} R_{nl}(r) - \frac{1}{r} R_{nl}(r) = E_{nl} R_{nl}(r)$$

A Schrödinger egyenlet megoldásai:

$$E_{nl} = E_n = \frac{1}{n^2} \frac{1}{2} \frac{ke^2}{a_0}, \quad n = 1, 2, \dots$$

$$\psi_{nlm} = \mathcal{N} e^{-\frac{r}{na_0}} \left(\frac{2r}{na_0} \right)^l L_{n-l-1}^{2l+1} \left(\frac{2r}{na_0} \right) Y_l^m(\vartheta, \varphi)$$

ahol L_{n-l-1}^{2l+1} a Laguerre polinom. A hidrogén atom energiája független l -től, ezért egy energia nivóhoz több egymásra ortogonális sajátállapot tartozik. Az energia szint elfajult.

Az energia szintek elfajultsága: n rögzített, $l = 0, 1 \dots n-1$ Egy adott l értékhez $2l+1$ m érték tartozik, amely szintén nem befolyásolja az energiát.

Az elfajultság tehát:

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

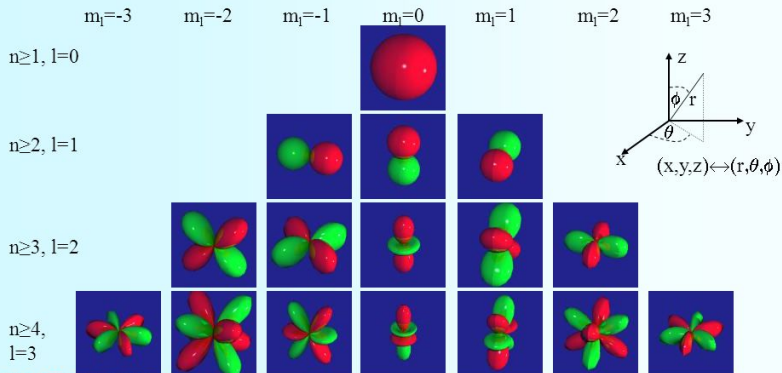
A hidrogén atom

H-atom

H-ion potenciáltere: $V(\mathbf{r}) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} [\text{SI}] = -\frac{1}{r} [\text{au}] \sim -\frac{1}{r}$

$V(\mathbf{r})$ gömbszimmetrikus: $\phi(\mathbf{r})$ gömbfüggvény!

$\phi(\mathbf{r}) = R_{n,l}(r) Y_l^{m_l}(\theta, \phi)$ $n=1,2,3,\dots$ $l=0,1,\dots,n-1$ $|m_l| \leq l$



Dr. Gali Ádám, egyetemi adjunktus
BME Fizikai Intézet, Atomfizika Tanszék,
Földfizika Laboratórium
1111 Budapest, Budafoki út 8.
T: 463-1380 F: 463-4357

E: agali@eik.bme.hu

W: <http://www.fat.bme.hu>