

Poniżej przedstawiony jest schemat rozwiązania równania Schrödingera dla elektronu w atomie wodoru, który przedstawiony był na wykładach. Na ćwiczeniach nie będziemy tego w całości powtarzać. Właściwe zadania są na drugiej stronie.

1. **Jednostki atomowe** W obliczeniach często wygodniej, niż układem SI, jest posługiwać się atomowym układem jednostek. W układzie tym przyjmujemy następujące wartości stałych:

- $\hbar = 1$
- $2m_e = 1$
- $e^2 = 2$
- $4\pi\epsilon_0 = 1$

Przy takim przyjęciu jednostek, jednostką długości jest 1 promień Bohra $a_B = 0.529 \text{ \AA} = 0.529 \cdot 10^{-10} \text{ m}$, a jednostką energii jest 1 Ry (Rydberg, $1 \text{ Ry} = \frac{\hbar^2}{2m a_B^2} = 13.6 \text{ eV} = 13.6 \cdot 1.6 \cdot 10^{-19} \text{ J} = 21.76 \cdot 10^{-19} \text{ J}$).

2. Zapisać równanie Schrödingera dla elektronu w atomie wodoru.
3. Doprowadzić je do postaci bezwymiarowej przy użyciu jednostek atomowych.
4. Sprawdzić komutację hamiltonianu z L^2 i L_z .
5. Przeprowadzić separację zmiennych poszukując funkcji falowej w postaci $\Psi(r, \theta, \varphi) = R(r)Y_{lm}(\theta, \varphi)$.
6. Znając rozwiązania równania własnego dla operatora L^2 uzyskać równanie na funkcję radialną $R(r)$:

$$\frac{\partial^2 R}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial R}{\partial r} - l(l+1) \frac{R}{r^2} + (E - V(r))R = 0 \quad (1)$$

7. Zbadać asymptotykę równania radialnego:

- Dla $r \rightarrow 0$ postać rozwiązania narzucają najbardziej rozbieżne wyrazy równania, co powoduje że można zaniedbać wyraz $(V(r) - E)$. To sprowadza równanie do równania Eulera, które łatwo rozwiązać, odp: r^l .
- Dla $r \rightarrow \infty$ można pominąć wszystkie wyrazy rzędu $1/r$ i $1/r^2$. To sprowadza rozwiązanie do całkowania elementarnego. odp: $\exp(-\kappa r)$, $\kappa = \sqrt{|E|}$.

8. Rozwiązania ogólnego równania radialnego można teraz szukać w postaci $R(r) = \chi(r) \exp(-\kappa r) r^l$. Wstawić postulowaną funkcję do równania radialnego i uprościć uzyskane równanie.
9. Po przekształceniach równanie redukuje się do postaci:

$$r\chi'' + \chi'(2l+2-2\kappa r) + \chi(2-2\kappa l-2\kappa) = 0 \quad (2)$$

W równaniu podstawić nową zmienną bezwymiarową $y = 2\kappa r$. Uzyskane w ten sposób równanie rozwiązuje się rzecz jasna metodą szeregów potęgowych. Jakie można wygenerować rozwiązania dla próbnych wielomianów stopnia 0 i 1 przyjmując $l = 0, 1, 2$? Jakie energie mają stany dla tak uzyskanych funkcji radialnych?

10. Uzyskane w poprzednim punkcie równanie porównać z równaniem Laguerra (patrz ksero z funkcjami specjalnymi). Aby ogólne rozwiązania równania były skończone, parametr stojący przy χ musi być liczbą naturalną $n = 0, 1, 2, \dots$ (rzęd wielomianu Laguerra). Pozwala to zapisać wzór ogólny na dozwolone wartości własne energii.
11. Zapisać rozwiązanie ogólne równania radialnego w postaci iloczynu rozwiązań asymptotycznych i odpowiedniego wielomianu Laguerra. Funkcja zależy od dwóch liczb kwantowych, N (główna) i l (orbitalna):

$$R_{Nl}(r) = C r^l \exp(-\sqrt{|E|}r) L_{N-l-1}^{2l+1}(2\sqrt{|E|}r) \quad (3)$$

$E = -\frac{1}{N^2}$ (w Rydbergach). $L_{N-l-1}^{2l+1}(x)$ jest wielomianem Laguerra. Kilka przykładów wielomianów: (wielomiany bez indeksu na górze nazywamy zwykłymi, z indeksem – stowarzyszonymi)

$$L_0 = 1 \quad (4)$$

$$L_1 = 1 - x \quad (5)$$

$$L_2 = \frac{1}{2}(x^2 - 4x + 2) \quad (6)$$

$$L_n^m(x) = (-1)^m \frac{d^m}{dx^m} L_{n+m}(x) \quad (7)$$

$$L_n^0 = L_n \quad (8)$$

$$L_0^m = m! \quad (9)$$

$$L_1^1 = 2 - x \quad (10)$$

Zadania

Przydatna całka: $\int_0^\infty x^n \exp(-ax) = \frac{n!}{a^{n+1}}$

1. Zapisać pełną funkcję falową stanów 1s, 2s i 2p. Unormować części radialne.
2. Obliczyć wartość oczekiwaną odległości elektronu od jądra w stanach 1s, 2s, 2p oraz odległość dla której radialna gęstość prawdopodobieństwa $r^2|R(r)|^2$ ma maksimum. Porównać i skomentować różnicę.
3. Obliczyć gęstość prawdopodobieństwa znalezienia elektronu na jądrze ($|\Psi|^2$ dla $r = 0$) w stanach 1s, 2s, 2p.
4. Obliczyć wartość średnią energii potencjalnej i kinetycznej w stanie 2s. Jaki jest ich stosunek? Czy to jest wynik ogólny?