Hidrojen Atomu

Çekirdek ve bir elektrondan oluşan hidrojen atomu ve benzeri iyonların çözümü tipik iki cisim problemidir. Kütle merkezinin hareketi bir serbest tanecik problemidir. Burada, çok daha önemli olan bağıl hareket incelenecektir.

Çekirdekteki proton sayısına eşit olan atom numarası Z,

Elektron yükü e,

Hidrojen atomu ya da benzeri iyonların yarıçapı r ve

Boşluğun elektrik geçirgenliği ε_0

Olmak üzere; elektronun çekirdeğe göre bağıl hareketi için

<u>Varsayım 1:</u>

$$H = T + V$$

$$T = \frac{p^2}{2\mu} = \left(\frac{1}{2\mu}\right)\left(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2\right)$$

$$V = -\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r}$$

$$H = \left(\frac{1}{2\mu}\right)\left(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2\right) - \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r}$$

<u>Varsayım 2:</u>

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2\mu}\left[\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)^2 + \left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial y}\right)^2 + \left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial z}\right)^2\right] - \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r}$$

$$\mathcal{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 - \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r}$$

<u>Varsayım 3-4:</u>

$$\mathcal{H}\Psi = E\Psi$$

$$-\left(\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 + \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\right)\Psi = E\Psi$$

$$\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\Psi}{\partial}\right)+\frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\Psi}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2\Psi}{\partial\phi^2}+\frac{2\mu}{\hbar^2}\left(E+\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\right)\Psi=0$$

Elektronun durumunu gösteren Ψ dalga fonksiyonu

$$\Psi\equiv\Psi(r,\theta,\phi)\equiv R(r)\,Y(\theta,\phi)$$

$$Y(\theta,\phi)=\Theta(\theta)\Phi(\phi)$$

$$\Psi\equiv\Psi(r,\theta,\phi)\equiv R(r)\,\Theta(\theta)\Phi(\phi)$$

$$R(r)\,\Theta(\theta)\Phi(\phi)\equiv R\Theta\Phi$$

Şeklinde yerine yazıldıktan sonra Schrödinger denklemi değişkenlerine ayrıldığında

$$\frac{2lE}{\hbar^2}=l(l+1)$$

ve

$$|m_l|\leq l$$

Olmak üzere sırayla aşağıdaki diferansiyel denklemler bulunur.

$$\frac{d^2\Phi}{d\phi^2}+m_l^2\Phi=0$$

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d\Theta}{d\theta}\right)+\left(l(l+1)-\frac{m_l^2}{\sin^2\theta}\right)\Theta=0$$

$$\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right)+\left[\frac{2\mu r^2}{\hbar^2}\left(E+\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\right)-l(l+1)\right]R=0$$

Bu denklemleri çözümünden sırayla bulunan Φ, Θ ve R dalga fonksiyonlarının çarpımından Ψ toplam dalga fonksiyonuna geçilir. Ayrıca, son eşitliğin çözümünden elektronun E enerjisi de bulunur.