



Jelen dokumentumra a Creative Commons Nevezd meg! – Ne add el! – Ne változtasd meg! 3.0 licenc feltételei érvényesek: a művet a felhasználó másolhatja, többszörözheti, továbbadhatja, amennyiben feltünteti a szerző nevét és a mű címét, de nem módosíthatja, és kereskedelmi forgalomba se hozhatja. Felhasználásakor a szerző nevén és a cikk címén kívül meg kell jelölni a forrását: <http://www.zmgzeg.sulinet.hu/tantargy/fizika>

Juhász Tibor:

A Schrödinger-egyenlet és egyszerű alkalmazásai

Tartalom

A hullámfüggvény.....	1
Az időtől független Schrödinger-egyenlet	3
Részecske végtelenül magas falú potenciáldobozban	5
A részecske energiája	5
A megoldás normalizálása	6
Gömbszimmetrikus megoldások	8
A hidrogénatom alapállapota	9
A hidrogénatom elektronjának energiája	10
A hidrogénatom mérete	11
Felhasznált irodalom	12

Az alábbiakban középiskolás szinten bemutatjuk a Schrödinger-egyenletet, majd megadjuk néhány egyszerű megoldását. Matematikából csak a differenciál- és integrálszámítás elemi ismeretét tételezzük fel.

A hullámfüggvény

A 20. század elején a fizikusok felismerték, hogy a részecskék hullámtulajdonságokkal rendelkeznek. A részecske–hullám kettősséget a de Broglie-törvény¹ fejezi ki, amely összekapcsolja a részecske $p = mv$ lendületét a λ hullámhosszal:

$$mv = \frac{h}{\lambda}$$

A részecskehullám viselkedését az úgynevezett hullámfüggvény írja le, melynek értelmezésére hamarosan rátérünk. A hullámfüggvény a hely és az idő függvénye: $\Psi(x, y, z, t)$. A függvényérték általában komplex szám. A továbbiakban a részecskék mozgását egy dimenzióban vizsgáljuk, és eltekintünk a relativisztikus hatásoktól. Az egydimenziós rendszerekből levonható következtetések segítik a bonyolultabb, háromdimenziós rendszerek vizsgálatát. Sok egydimenziós probléma általánosítható a háromdimenziós esetekre.

Egy dimenzióban a hullámfüggvény valamilyen $\Psi(x, t)$ alakban adható meg. Tovább egyszerűsítjük a vizsgálatot, ha csak állandósult (stacionárius) állapotokkal foglalkozunk, amikor a hullámfüggvény már nem függ az időtől. Az időtől független hullámfüggvényre használjuk a $\psi(x)$ jelölést! Egyszerűbb esetekben a $\psi(x)$ értéke valós szám.²

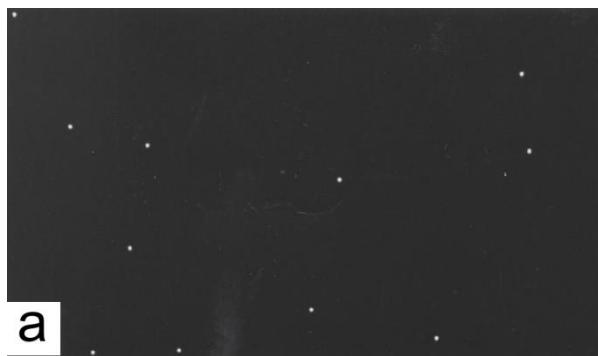
¹ Louis de Broglie, 1924.

² Bizonyítható, hogy ha a részecske potenciális energiája nem függ az időtől, akkor $\Psi(x, t) = \psi(x) \cdot \chi(t)$, azaz a Ψ hullámfüggvény felírható két, egymástól független komponens szorzataként. A ψ csak a hely, a χ pedig csak az idő függvénye.

A leggyakoribb értelmezési mód szerint³, ha a hullámfüggvény abszolút értékének négyzetét integráljuk, akkor a részecske P tartózkodási valószínűségét kapjuk meg a koordinátatengely egy meghatározott $[a, b]$ intervallumában (háromdimenziós esetben a tér egy megadott tartományában):

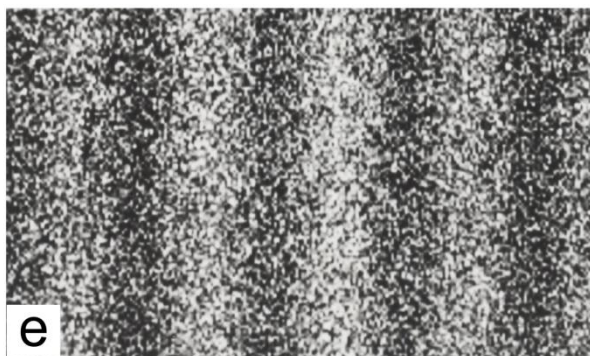
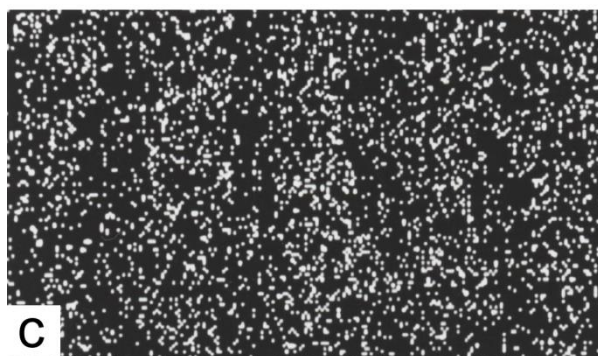
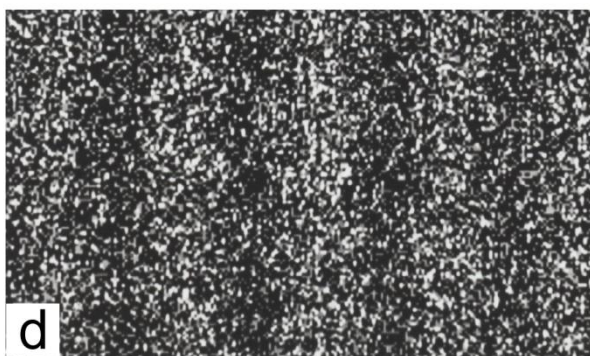
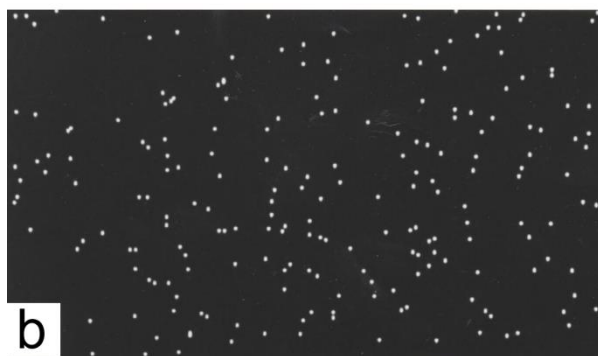
$$P = \int_a^b |\psi(x)|^2 dx$$

Valós függvényértékek esetén a négyzetre emelés miatt elhagyhatjuk az abszolútértéket.



Kétréses interferenciakísérlet elektronokkal
a) 11 elektron b) 200 elektron
c) 6000 elektron d) 40 ezer elektron
e) 140 ezer elektron

Minden részecske egy tetszőleges, véletlenszerűen kiválasztott pontba érkezik. Ahol nagyobb a ψ^2 értéke, oda több elektron csapódik be. (Wikimedia)



Mivel a részecske biztosan megtalálható valahol, ezért az egész „térre” nézve a tartózkodási valószínűség 1-gyel egyenlő:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1$$

Ennek a feltételnek a kielégítését a hullámfüggvény *normalizálásának* nevezzük.

A hullámfüggvénytől elvárjuk továbbá, hogy értéke folytonosan változzon (ne legyenek rajta szakadások).

³ Max Born, 1926. A tartózkodási valószínűségként való értelmezést gyakran koppenhágai interpretációnak nevezik, mert kidolgozásának idején Born Koppenhágában dolgozott.

Megjegyezzük, hogy a hullámok időtől független, állandósult állapota valamilyen állóhullámnak felel meg.

Az időtől független Schrödinger-egyenlet

A makroszkopikus testek mozgását Newton 2. törvényének a segítségével határozhatjuk meg. A törvény a test a gyorsulását és a testre ható erők eredőjét kapcsolja össze:

$$ma = \sum F$$

A gyorsulás azonban a test helyzetét leíró $x(t)$ függvény második deriváltja. Így Newton 2. törvényét a deriváltra vonatkozó, úgynevezett differenciálegyenlet formájában is megadhatjuk:

$$m \frac{d^2x}{dt^2} = \sum F$$

A fizika legtöbb törvénye szintén differenciálegyenlet. A differenciálegyenletek a fizikai mennyiségek deriváltjait kapcsolják össze például a környezeti hatásokkal.

A részecskék viselkedését a Schrödinger-egyenlet határozza meg.⁴ A Newton-törvénnyel ellentétben a Schrödinger-egyenlet megoldása nem a részecske pályáját, hanem a hullámfüggvényét szolgáltatja.

A Schrödinger-egyenlet ugyanolyan szerepet játszik a részecskék viselkedésének a leírásában, mint a Newton-törvények a klasszikus mechanikában. Segítségével meghatározható egy részecske mozgása (viselkedése), ha ismerjük a rá ható erőket. A kvantumfizikában azonban erők helyett inkább a potenciális energiával jellemzik a részecske környezetét.

A Schrödinger-egyenlet egy másodrendű, parciális differenciálegyenlet, melynek megoldásához a differenciálegyenletek elméletén túl a komplex számok ismerete is szükséges. Itt csak az időtől független, egydimenziós alakjával foglalkozunk, amely jóval egyszerűbben megérthető és kezelhető. A továbbiakban elhagyjuk az „időtől független” jelzőt, és egyszerűen csak Schrödinger-egyenletről beszélünk.

A természeti törvényeket kísérletek, megfigyelések útján határozzuk meg. Ilyen értelemben magát a Schrödinger-egyenletet nem lehet levezetni.

Az alábbiakban egy egyszerű gondolatmenettel szemléltetjük, hogyan juthatunk el egy ilyen egyenlet megfogalmazásához.

Keressük a részecskékre vonatkozó törvényt differenciálegyenlet formájában! Mivel a részecskék hullámként viselkednek, induljunk ki egy szinuszhullámot leíró függvényből:

$$\psi(x) = A \sin\left(\frac{2\pi}{\lambda}x\right)$$

ahol A az amplitudó, λ pedig a hullámhossz.

Vezessük be a

$$k = \frac{2\pi}{\lambda}$$

jelölést! Így:

$$\psi(x) = A \sin kx$$

Vegyük észre, hogy a de Broglie-törvény alapján a részecske lendülete kifejezhető a k -val:

$$p = \frac{h}{\lambda} = \hbar k$$

⁴ Erwin Schrödinger, 1926

Mivel differenciálegyenletet keresünk, deriváljuk az egyenletet:

$$\frac{d\psi}{dx} = kA \cos kx$$

Ha még egyszer elvégezzük a deriválást, akkor a kapott egyenletet könnyen összekapcsolhatjuk a kiindulási egyenlettel, tehát magával a hullámfüggvénnyel:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -k^2 A \sin kx$$

Azaz:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -k^2\psi$$

Fentebb megmutattuk, hogy a részecske lendülete kifejezhető $p = \hbar k$ formában, így K mozgási (kinetikus) energiája a $K = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{p^2}{2m}$ összefüggés alapján:

$$K = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

ahonnan:

$$k^2 = \frac{2mK}{\hbar^2}$$

Ezt felhasználva:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -k^2\psi = -\frac{2mK}{\hbar^2}\psi$$

A K kinetikus energia az E összenergia és az $U(x)$ potenciális energia különbsége, így:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = \frac{2m}{\hbar^2} [U(x) - E]\psi$$

Ezt az egyenletet nevezzük időtől független Schrödinger-egyenletnek. Ha ismerjük a potenciális energia $U(x)$ függvényét, akkor az egyenlet megoldásával megkapjuk a részecske viselkedését leíró $\psi(x)$ függvényt.

Vegyük észre, hogy ha egy ψ függvény kielégíti a fenti egyenletet, akkor az $A\psi$ függvény is kielégíti (ahol A tetszőleges valós szám). Az A konkrét értékét általában a hullámfüggvény normalizálásával kapjuk meg.

Megjegyezzük, hogy konzervatív erőtér esetén Newton második törvénye szintén felírható a potenciális energia segítségével. Ebben az esetben ugyanis:

$$F = -\frac{dU}{dx}$$

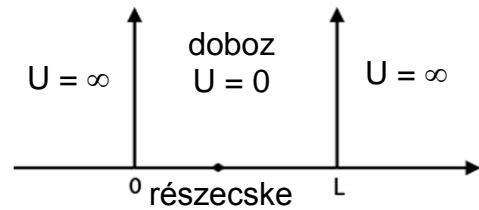
így

$$m \frac{d^2x}{dt^2} = -\frac{dU}{dx}$$

Részecske végtelenül magas falú potenciáldobozban

A Schrödinger-egyenlet megoldását először egy idealizált esetre mutatjuk be, amelyből valós következtetéseket is levonhatunk.

Mozogjon a részecske az x tengely mentén egy olyan potenciáldobozban, melyet végtelenül magas falak határolnak! A két fal távolsága legyen L . Az egyik fal az $x=0$, a másik pedig az $x=L$ pontban helyezkedjen el. A falak között nem hat a részecskére erő, így ott a potenciális energia 0:



$$U(x) = 0 \quad (0 < x < L)$$

A falak végtelenül magasak, így a hozzájuk tartozó tartományban a potenciális energia is végtelen nagy (végtelen nagy erő szükséges ahhoz, hogy a részecske behatoljon a falakba⁵):

$$U(x) = \infty \quad (x \leq 0 \text{ vagy } x \geq L)$$

A részecske stacionárius állapotát keressük, ezért a Schrödinger-egyenlet időtől független alakját fogjuk felhasználni. A falak között $U = 0$, így $0 < x < L$ esetén:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{2m}{\hbar^2} E\psi$$

A differenciálegyenletek elméletéből ismeretes, hogy ennek az egyenletnek a megoldásai felírhatók a következő alakban:

$$\psi(x) = A \cos\left(\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} x\right) + B \sin\left(\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} x\right)$$

Deriválással ellenőrizzük az állítás helyességét!

Feladatunk még az A és B konstansok értékének a meghatározása.

Mivel a részecske nem kerülhet ki a dobozból (ehhez végtelen nagy energiára lenne szüksége), így a falak tartományában $\psi(x) = 0$ ($x < 0$ vagy $x > L$). Mivel a ψ folytonos függvény, ezért a $\psi = 0$ feltétel $x=0$ és $x=L$ esetén is fennáll. $x=0$ -ra:

$$0 = A \cos 0 + B \sin 0 = A$$

ezért a megoldás koszinuszos tagját elhagyhatjuk:

$$\psi(x) = B \sin\left(\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} x\right)$$

A részecske energiája

Tekintsük a másik határfeltételt! $x=L$ esetén a ψ szintén 0, így:

$$0 = B \sin\left(\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} L\right)$$

Ennek alapján vagy a B , vagy pedig a szinuszos kifejezés értéke 0. Mivel a részecske biztosan tartózkodik valahol, ezért az A és a B egyszerre nem lehet 0. Így

$$\sin\left(\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} L\right) = 0$$

⁵ Ennek következtében itt nem lép fel alagút-effektus.

Ez a feltétel akkor teljesül, ha

$$\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} L = 0, \pi, 2\pi, 3\pi, \dots$$

Azaz

$$\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} L = n\pi$$

ahol n tetszőleges nemnegatív egész szám.

Arra a következtetésre jutottunk, hogy a részecske energiája csak egymástól elkülönülő, kvantált értékeket vehet fel:

$$E_n = \frac{\hbar^2}{8mL^2} n^2$$

ahol $n = 0, 1, 2, 3, \dots$. Az n értékét kvantumszámnak nevezzük.

Vegyük figyelembe, hogy $n = 0$ -ra $E_0 = 0$ adódna, ezért a ψ értéke is zérus lenne bárhol a dobozon belül. Ez ellentmondana a normalizálási feltételnek. Így a lehetséges energiaszintek:

$$E_n = \frac{\hbar^2}{8mL^2} n^2$$

ahol $n = 1, 2, 3, \dots$. Ez azt jelenti, hogy az alapállapotban ($n=1$) lévő részecske energiája sem nulla!

A megoldás normalizálása

A B értékét a hullámfüggvény normalizálásával kapjuk meg:

$$\int_0^L |\psi(x)|^2 dx = 1$$

azaz

$$\int_0^L B^2 \sin^2\left(\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} x\right) dx = 1$$

Deriválással meggyőződhetünk az alábbi összefüggés helyességéről:

$$\int \sin^2(ax) dx = -\frac{1}{2a} \sin(ax) \cos(ax) + \frac{x}{2}$$

Ennek felhasználásával:

$$\int_0^L \sin^2(ax) dx = \left[-\frac{1}{2a} \sin(ax) \cos(ax) + \frac{x}{2}\right]_0^L$$

$x=0$ -ra a primitív függvény helyettesítési értéke 0. Így elegendő a felső határt behelyettesíteni:

$$\int_0^L \sin^2(ax) dx = -\frac{1}{2a} \sin(aL) \cos(aL) + \frac{L}{2}$$

A hullámfüggvény esetén

$$a = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

Így:

$$\int_0^L \sin^2(ax) dx = -\frac{1}{2a} \sin\left(\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} L\right) \cos\left(\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} L\right) + \frac{L}{2}$$

Felhasználva a részecske energiájának meghatározásánál felírt

$$\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} L = n\pi$$

összefüggést:

$$\int_0^L \sin^2(ax) dx = -\frac{1}{2a} \sin(n\pi) \cos(n\pi) + \frac{L}{2}$$

A szinuszos tag mindig nulla, így:

$$\int_0^L \sin^2(ax) dx = \frac{L}{2}$$

Az eredeti egyenlet bal oldala tehát:

$$\int_0^L B^2 \sin^2\left(\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} x\right) dx = B^2 \int_0^L \sin^2\left(\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} x\right) dx = B^2 \frac{L}{2}$$

így:

$$B^2 \frac{L}{2} = 1$$

azaz:

$$B = \sqrt{\frac{2}{L}}$$

A hullámfüggvény normalizált formája tehát:

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} x\right)$$

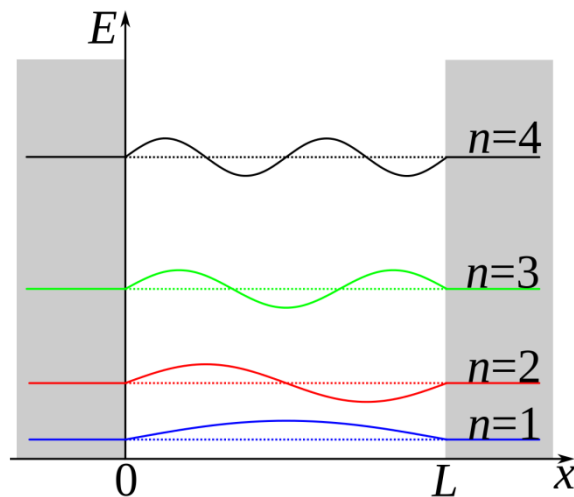
Felhasználva az energiára kapott összefüggést, a lehetséges megoldások $0 < x < L$ esetén:

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$$

egyébként pedig $\psi_n(x) = 0$.

Kiemeljük, hogy végtelen sok megoldást kaptunk. Az egyes megoldások egy-egy állóhullámnak felelnek meg. (Az ábrát lásd a túloldalon.)

Vegyük észre, hogy $n > 1$ esetén a dobozon belül is kialakulnak csomópontok, amelyeknél a részecske tartózkodási valószínűsége 0! A részecske (pontosabban a részecskehullám) tehát úgy is áthaladhat a csomópont egyik feléről a másik felére, hogy sohasem tartózkodik a csomópontban!



Állóhullámok a végtelenül magas potenciáldobozban (Wikimedia)

Gömbszimmetrikus megoldások

Következő példánk gömbszimmetrikus potenciáltérben (például a hidrogénatomban) mutatja meg a Schrödinger-egyenlet megoldását. Ebben az esetben már nem vizsgálódhatunk egy dimenzióban. A háromdimenziós Schrödinger-egyenlet felírásához vezessük be egy többváltozós függvény parciális deriváltjait!

A többváltozós függvény adott változó szerinti parciális deriváltját úgy határozzuk meg, hogy a többi változót konstansnak tekintjük, és az adott változó szerint deriválunk.

Az $f(x, y) = 2x^2y + 6xy^2 - 9y^3$ függvény x szerinti parciális deriváltja például:

$$\frac{\partial f}{\partial x} = 4xy + 6y^2$$

Az időtől független Schrödinger-egyenlet háromdimenziós alakja a $\psi(x, y, z)$ hullámfüggvényre:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} = \frac{2m}{\hbar^2} [U(x, y, z) - E]\psi$$

Gömbszimmetrikus esetben célszerű áttérni polárkoordináta-rendszerbe, ahol a $\psi(r)$ hullámfüggvény értékét az origótól mért r távolság függvényében adjuk meg.

Az x, y, z szerinti deriváltak meghatározásához a $\psi(r)$ függvényt összetett függvénynek tekintjük, ahol $r = (x^2 + y^2 + z^2)^{1/2}$

Ennek x szerinti parciális deriváltja például az összetett függvény deriválási szabálya alapján:

$$\frac{\partial r}{\partial x} = \frac{\partial (x^2 + y^2 + z^2)^{1/2}}{\partial x} = \frac{1}{2} (x^2 + y^2 + z^2)^{-1/2} \cdot 2x = \frac{x}{r}$$

Az x szerinti első derivált az összetett függvény deriválási szabálya szerint:

$$\frac{\partial \psi(r)}{\partial x} = \frac{d\psi}{dr} \cdot \frac{\partial r}{\partial x} = \frac{d\psi}{dr} \cdot \frac{x}{r}$$

A ψ függvény x szerinti második deriválthoz először határozzuk meg az r második deriváltját. Közben felhasználjuk a hányados és az összetett függvény deriválási szabályát:

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 r}{\partial x^2} &= \frac{\partial \left(\frac{x}{r} \right)}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{x}{(x^2 + y^2 + z^2)^{1/2}} \right) = \\ &= (x^2 + y^2 + z^2)^{-1/2} + x \left(-\frac{1}{2} \right) (x^2 + y^2 + z^2)^{-3/2} \cdot 2x = \frac{1}{r} - \frac{x^2}{r^3} \end{aligned}$$

A ψ függvényre a szorzat és az összetett függvény deriválási szabálya alapján:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{d\psi}{dr} \cdot \frac{x}{r} \right) = \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{d\psi}{dr} \right) \cdot \frac{x}{r} + \frac{d\psi}{dr} \cdot \frac{\partial r}{\partial x}$$

A fent levezetett összefüggések felhasználásával:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = \frac{d^2 \psi}{dr^2} \cdot \left(\frac{x}{r} \right)^2 + \frac{d\psi}{dr} \cdot \left(\frac{1}{r} - \frac{x^2}{r^3} \right)$$

A többi változóra hasonló módon:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} = \frac{d^2 \psi}{dr^2} \cdot \left(\frac{y}{r} \right)^2 + \frac{d\psi}{dr} \cdot \left(\frac{1}{r} - \frac{y^2}{r^3} \right)$$

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} = \frac{d^2 \psi}{dr^2} \cdot \left(\frac{z}{r} \right)^2 + \frac{d\psi}{dr} \cdot \left(\frac{1}{r} - \frac{z^2}{r^3} \right)$$

Így a Schrödinger egyenlet bal oldala, elvégezve a kiemeléseket:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} = \frac{d^2 \psi}{dr^2} \cdot \left(\frac{x^2}{r^2} + \frac{y^2}{r^2} + \frac{z^2}{r^2} \right) + \frac{d\psi}{dr} \cdot \left(\frac{1}{r} - \frac{x^2}{r^3} + \frac{1}{r} - \frac{y^2}{r^3} + \frac{1}{r} - \frac{z^2}{r^3} \right)$$

Felhasználva, hogy

$$r^2 = x^2 + y^2 + z^2$$

megkapjuk a Schrödinger-egyenlet bal oldalának polárkoordinátás alakját gömbszimmetrikus esetben:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} = \frac{d^2 \psi}{dr^2} + \frac{d\psi}{dr} \cdot \left(\frac{3}{r} - \frac{r^2}{r^3} \right)$$

azaz

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} = \frac{d^2 \psi}{dr^2} + \frac{2}{r} \cdot \frac{d\psi}{dr}$$

Maga a Schrödinger-egyenlet pedig:

$$\frac{d^2 \psi}{dr^2} + \frac{2}{r} \cdot \frac{d\psi}{dr} = \frac{2m}{\hbar^2} [U(r) - E] \psi(r)$$

A hidrogénatom alapállapota⁶

A hidrogénatomot egy proton és egy elektron alkotja. A proton gömbszimmetrikus elektromos mezőt alakít ki maga körül, melyben egy tőle r távolságra lévő pont potenciálja kQ/R , ahol $Q=1,6 \cdot 10^{-19}$ C a proton (és az elektron) töltése, a konstans értéke pedig $k=9 \cdot 10^9$ Nm²/C². Így az elektron potenciális energiája:

$$U(r) = -k \frac{Q^2}{r}$$

A gömbszimmetrikus erőtér miatt keressük meg a

$$\frac{d^2 \psi}{dr^2} + \frac{2}{r} \cdot \frac{d\psi}{dr} = \frac{2m}{\hbar^2} \left(-k \frac{Q^2}{r} - E \right) \psi(r)$$

Schrödinger-egyenlet gömbszimmetrikus megoldását! A differenciálegyenletek elmélete szerint a megoldás felírható a következő formában:

$$\psi(r) = A e^{-r/r_0}$$

⁶ Marx Gy.: Életrelő atomok (Akadémiai Kiadó, 1978) alapján.

Határozzuk meg a deriváltakat:

$$\frac{d\psi}{dr} = Ae^{-r/r_0} \cdot \left(-\frac{1}{r_0}\right) = -\frac{A}{r_0} e^{-r/r_0}$$

$$\frac{d^2\psi}{dr^2} = -\frac{A}{r_0} e^{-r/r_0} \cdot \left(-\frac{1}{r_0}\right) = \frac{A}{r_0^2} e^{-r/r_0}$$

A kapott deriváltakat helyettesítsük be a Schrödinger-egyenletbe:

$$\frac{A}{r_0^2} e^{-r/r_0} - \frac{2}{r} \cdot \frac{A}{r_0} e^{-r/r_0} = -\frac{2m}{\hbar^2} \left(k \frac{Q^2}{r} + E\right) A e^{-r/r_0}$$

Elvégezve a lehetséges egyszerűsítéseket:

$$\frac{2}{rr_0} - \frac{1}{r_0^2} = \frac{2m}{\hbar^2} \left(k \frac{Q^2}{r} + E\right)$$

A hidrogénatom elektronjának energiája

Határozzuk meg a fenti egyenletben szereplő E (összenergia) értékét!

Az egyenletnek minden r -re fenn kell állnia. Tekintsük azt az esetet, amikor az r nagyon nagy. Ekkor elhanyagolhatjuk azokat a tagokat, melyekben az r a nevezőben szerepel:

$$-\frac{1}{r_0^2} = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

azaz

$$r_0^2 = -\frac{\hbar^2}{2mE}$$

Helyettesítsük be az egyenletbe az $r = r_0$ értéket:

$$\frac{2}{r_0^2} - \frac{1}{r_0^2} = \frac{2mkQ^2}{\hbar^2 r_0} + \frac{2mE}{\hbar^2}$$

Az r_0^2 -re kapott összefüggés alapján:

$$-\frac{2mE}{\hbar^2} = \frac{2mkQ^2}{\hbar^2 r_0} + \frac{2mE}{\hbar^2}$$

Ebből:

$$r_0 = -\frac{kQ^2}{2E}$$

Emeljük négyzetre, és hasonlítsuk össze a fentebb kapott értékével:

$$\frac{k^2 Q^4}{4E^2} = -\frac{\hbar^2}{2mE}$$

azaz

$$E = -\frac{mk^2 Q^4}{2\hbar^2} = -2,19 \cdot 10^{-18} \text{ joule}$$

Így megkaptuk a hidrogénatom elektronjának energiáját alapállapotban.

A hidrogénatom mérete

Az energia ismeretében az r_0 értékét is kiszámíthatjuk:

$$r_0 = -\frac{kQ^2}{2E} = \frac{\hbar^2}{mkQ^2} = 5,26 \cdot 10^{-11} \text{ méter}$$

Az r_0 értelmezéséhez határozzuk meg azt a pozíciót, ahol a legnagyobb valószínűséggel tartózkodik az alapállapotú hidrogénatom elektronja!

Tekintsünk egy vékony, dr vastagságú és r sugarú gömbhéjat az atommag körül. Az elektron tartózkodási valószínűsége ezen a dV térfogatú gömbhéjon belül:

$$dP = \psi^2 dV$$

A térfogatot megkapjuk, ha a gömbhéj felszínét megszorozzuk a vastagságával (vékony a gömbhéj!): $dV = 4\pi r^2 dr$, így

$$dP = (Ae^{-r/r_0})^2 4\pi r^2 dr = A^2 e^{-2r/r_0} 4\pi r^2 dr$$

A valószínűségnek ott lesz maximuma, ahol a dr szorzótényezője maximális értéket vesz fel. A maximumhelyet könnyebben meghatározhatjuk, ha áttérünk az $x=r/r_0$ változóra:

$$A^2 e^{-2r/r_0} 4\pi r^2 = A^2 r_0^2 e^{-2r/r_0} 4\pi \frac{r^2}{r_0^2} = A^2 r_0^2 4\pi e^{-2x} x^2$$

A konstans szorzótényezőket elhagyva, a szélsőérték hely az

$$(e^{-2x} x^2)' = 0$$

egyenletből kapható meg.

A szorzatfüggvény és az összetett függvény deriválási szabályát felhasználva:

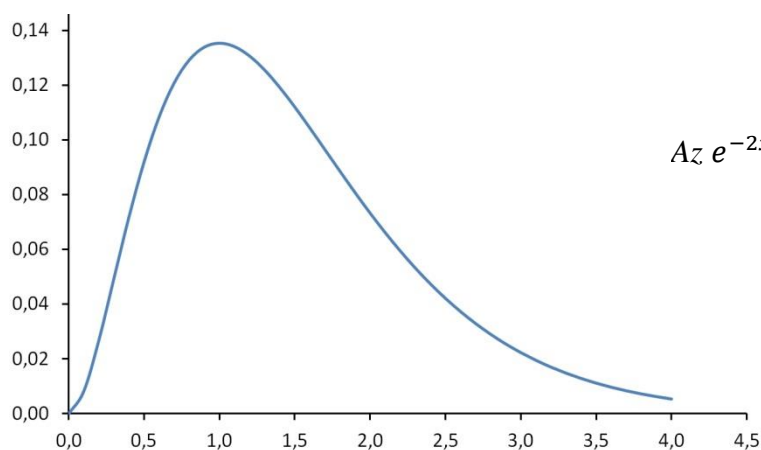
$$(e^{-2x} x^2)' = -2e^{-2x} \cdot x^2 + e^{-2x} \cdot 2x = 0$$

Azaz:

$$-x^2 + x = 0$$

Az egyenlet megoldásai: $x=0$, illetve $x=1$. $x=0$ esetén a tartózkodási valószínűség 0, itt tehát nem lehet maximumhely.

Összegezve: az $x=1$, azaz az $r=r_0$ helyen a legnagyobb az elektron tartózkodási valószínűsége. Így a fentebb meghatározott $r_0=5,26 \cdot 10^{-11}$ méter értéket tekinthetjük az alapállapotú hidrogénatom sugarának (az elektronpálya sugarának).



Az $e^{-2x} x^2$ függvény grafikonja

Felhasznált irodalom

- Freiberger, M.: Schrödinger's equation – in action
(+plus living mathematics, <http://plus.maths.org/>)
- Marx György: Éltrevaló atomok (Akadémiai Kiadó, 1978)
- Nave, C.R.: HyperPhysics (2014, <http://hyperphysics.phy-astr.gsu.edu/>)
- Smith, B.J.: Quantum Ideas, Lecture Notes
(<http://www.physics.ox.ac.uk/users/smithb/qid.html>)
- Taylor, J.R.–Zafiratos, C.–Dubson, M.A.: Modern Physics for Scientists and Engineers
(2004, Prentice Hall)