Schrødingerligningen for Brintatomet

Separation af de variable og radiel bølgefunktion

Jacob Nielsen

Schrødingers bølgeligning til beskrivelse af brintatomet er opskrevet i ligning 1.1. Ψ er bølgefunktionen, der beskriver elektronen i brintatomet. Δ er Laplace operatoren. Potentialet V(r) er Coulombpotentialet givet ved ligning 1.6. E er elektronens energi, som kendes fra Bohrs model af brintatomet. I et centralt potentiale som V(r), der kun afhænger af afstanden til protonen, er det praktisk at bruge sfæriske koordinater. I sfæriske koordinater antager Laplace-operatoren formen givet ved ligning 1.2[1], hvor L er impulsmoment operatoren. Leddet med L^2 udtrykker elektronens rotationsenergi i bevægelsen omkring protonen.

$$1.1 \qquad -\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta\Psi + V(r)\cdot\Psi = E\cdot\Psi \quad\wedge\quad \hbar = \frac{h}{2\pi} \quad\wedge\quad \mu = \frac{m_e\cdot m_p}{m_e + m_p}$$

$$1.2 \qquad \Delta = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} - \frac{L^2}{\hbar^2 r^2}$$

$$1.3 \qquad \Psi_{(n,l,m)}(r,\theta,\varphi) = R_{(n,l)}(r)\cdot Y_{(l,m)}(\theta,\varphi)$$

$$1.4 \qquad L^2(Y_{(l,m)}) = \hbar^2\cdot l\cdot(l+1)\cdot Y_{(l,m)}$$

$$1.5 \qquad -\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} - \frac{l\cdot(l+1)}{r^2}\right)R_{(n,l)}(r) + V(r)\cdot R(r)_{(n,l)} = E\cdot R_{(n,l)}(r)$$

$$1.6 \qquad V(r) = -\frac{k_c}{r}$$

$$1.7 \qquad R_{(1,0)}(r) = 2\cdot\left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2}\cdot e^{-r/a_0}$$

$$1.8 \qquad R_{(2,0)}(r) = 2\cdot\left(\frac{1}{2a_0}\right)^{3/2}\cdot\left(1-\frac{r}{2a_0}\right)\cdot e^{-r/2a_0}$$

$$1.9 \qquad R_{(2,1)}(r) = \frac{1}{\sqrt{3}}\cdot\left(\frac{1}{2a_0}\right)^{3/2}\cdot\left(\frac{r}{a_0}\right)\cdot e^{-r/2a_0}$$

$$1.10 \qquad P(r) = r^2 R_{(n,l)}^2$$

Schrødingerligningen for brintatomet kan løses ved separation af de variable. I ligning 1.3 er vist, hvordan bølgefunktionen kan skrives som et produkt af en radiel bølgefunktion R(r) og en vinkelafhængig bølgefunktion Y(θ,φ). Funktionen Y(θ,φ) er egenfunktion for impulsmomentoperatoren L^2, som det er vist i ligning 1.4. Efter separation af de variable fremkommer den radielle Schrødingerligning 1.5. Nogle løsningerne til den radielle ligning er opskrevet i 1.7 til 1.9, og 1.10 viser, hvordan den radielle sandsynlighedsfordeling for elektronen skal beregnes.

---

[1] Se for eksempel: Gasiorowicz, Quantum Physics, 3.edition, Wiley 2003, kapitel 8.