ΥΔΡΟΓΟΝΟΕΙΔΗ ΑΤΟΜΑ

Υδρογονοειδή είναι τα συστήματα εκείνα στα οποία ένα μοναδικό ηλεκτρόνιο περιστρέφεται γύρω από πυρήνα Z (ατομικός αριθμός) πρωτονίων π.χ. το άτομο του υδρογόνου και ιόντα που έχουν μόνο ένα ηλεκτρόνιο όπως He^{+}, Li^{++}, Be^{+++}κλπ.

Το ηλεκτροστατικό δυναμικό υπό την επίδραση του οποίου κινείται το ηλεκτρόνιο στο φυσικό σύστημα μονάδων είναι:

$$V_{(r)} = -\frac{Ze^2}{r}$$

Η ακτινική εξίσωση Schrödinger που ικανοποιεί η ακτινική κυματοσυνάρτηση $y_{(r)}$ είναι:

$$\frac{d^2 y_{(r)}}{dr^2} + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E + \frac{Ze^2}{r} - \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2}\right) y_{(r)} = 0 \quad (\mathbf{1})$$

Τα υδρογονοειδή άτομα είναι τρισδιάστατα κβαντομηχανικά συστήματα με κυματοσυναρτήσεις της μορφής:

$$\Psi_{nlm(r,\theta,\varphi)} = R_{nl(r)} Y^m_{l(\theta,\varphi)}$$

όπου

$R_{nl(r)} = \frac{y_{nl(r)}}{r}$ *οι ακτινικές κυματοσυναρτήσεις*

$Y^m_{l(\theta,\varphi)}$ *οι σφαιρικές αρμονικές*

n *ο κύριος κβαντικός αριθμός με τιμές* $n = 1,2,3,\ldots$

l *ο κβαντικός αριθμός της τροχιακής στροφορμής με τιμές* $l = 0,1,2,\ldots,n-1$

m *ο μαγνητικός κβαντικός αριθμός* L_z *με τιμές* $m = -l,\ldots,-1,0,1,\ldots,l$

Από τη λύση της διαφορικής εξίσωσης **(1)** προκύπτει ότι οι ενεργειακές ιδιοτιμές είναι:

$$E_n = -\frac{Z^2 m_e e^4}{n^2 2\hbar^2} \Rightarrow E_n = -Z^2 \frac{13{,}6\ eV}{n^2} \quad , n = 1,2,3, \ldots$$

Κάθε μία από τις ιδιοτιμές αυτές παρουσιάζει εκφυλισμό τάξης n^2, αφού οι ενεργειακές στάθμες εξαρτώνται αποκλειστικά απ' το κβαντικό αριθμό n και σε δεδομένο n αντιστοιχούν περισσότερες από μία τιμές των l και m.

Οι κυματοσυναρτήσεις $\Psi_{nlm(r,\theta,\varphi)}$ είναι ορθοκανονικοποιημένες.
Οι σφαιρικές αρμονικές Y_l^m είναι ιδιοσυναρτήσεις του L^2 και L_Z.

Επειδή οι τελεστές $\hat{L}^2$ και $\hat{L}_z$ δρουν μόνο στο γωνιακό μέρος των κυματοσυναρτήσεων $\Psi_{nlm(\vec{r})} = \Psi_{nlm(r,\theta,\varphi)}$, δηλαδή δρουν μόνο στις σφαιρικές αρμονικές $Y^m_{l(\theta,\varphi)}$ προκύπτουν οι εξισώσεις ιδιοτιμών:

$$\hat{L}^2 \Psi_{nlm(r,\theta,\varphi)} = R_{nl(r)} \hat{L}^2 Y^m_{l(\theta,\varphi)} = R_{nl(r)} l(l+1)\hbar^2 Y^m_{l(\theta,\varphi)} =$$

$$= l(l+1)\hbar^2 R_{nl(r)} Y^m_{l(\theta,\varphi)} = l(l+1)\hbar^2 \Psi_{nlm(r,\theta,\varphi)}$$

και

$$\hat{L}_z \Psi_{nlm(r,\theta,\varphi)} = R_{nl(r)} \hat{L}_z Y^m_{l(\theta,\varphi)} = R_{nl(r)} m\hbar Y^m_{l(\theta,\varphi)} =$$

$$= m\hbar R_{nl(r)} Y^m_{l(\theta,\varphi)} = m\hbar \Psi_{nlm(r,\theta,\varphi)}$$

Συγγραφή – Επιμέλεια: Παναγιώτης Φ. Μοίρας