

آتم هیدروژن ساده ترین آتم است و یک الکترون دارد. می توانیم مسائل برای آتم های هیدروژن گونه که تنها یک الکترون دارند حل کرده با توجه به اینکه همه های آنهایی توانسته پس از یک پروتون داشته باشند z تعداد پروتون هست.

$$V(r) = - \frac{ze^2}{r}$$

معادله شرودینگر برای $E < 0$: $\left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} \right) R + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left[E + \frac{ze^2}{r} - \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} \right] R = 0$

تغییر متغیر: $\rho = \left(\frac{8\mu|E|}{\hbar^2} \right)^{1/2} r$

$$\left(\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{d}{d\rho} \right) R(\rho) - \frac{l(l+1)}{\rho^2} R(\rho) + \left(\frac{\lambda}{\rho} - \frac{1}{4} \right) R(\rho) = 0$$

$$\begin{cases} \lambda = \frac{ze^2}{\hbar^2} \left(\frac{\mu}{2|E|} \right)^{1/2} = Z\alpha \left(\frac{\mu c^2}{2|E|} \right)^{1/2} \\ \alpha = \frac{e^2}{\hbar c} \end{cases}$$

ابتدا رفتار تابع $R(\rho)$ را در اشیای بزرگ و کوچک بررسی می کنیم. رفتار مجانبی $R(\rho)$

$$\rho \rightarrow \infty \Rightarrow \frac{d^2 R}{d\rho^2} - \frac{1}{4} R \approx 0 \rightarrow A e^{\rho/2} + B e^{-\rho/2} \Rightarrow \boxed{R(\rho) \sim e^{-\rho/2}}$$

$\alpha^2 = -\frac{1}{4} < 0$

برای G رابطه $\downarrow$ قرار می دهیم بر حسب H معادله دیفرانسیل می آید.

$$R(\rho) = e^{-\rho/2} G(\rho)$$

$$\boxed{G = \rho^l H}$$

$$\frac{d^2 G}{d\rho^2} - \left(1 - \frac{2}{\rho}\right) \frac{dG}{d\rho} + \left[\frac{\lambda-1}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right] G = 0$$

طوری که می بینیم تفاوت است.

$$\rho \rightarrow 0 \Rightarrow \frac{d^2 R}{d\rho^2} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} R \sim 0 \rightarrow \text{حواشی} \boxed{R(\rho) = \rho^l}$$

$$\boxed{R(\rho) = \rho^l e^{-\rho/2} H(\rho)}$$

$H(p)$ در p های بزرگ صرف توان می‌گردد. $H(p)$ تغییرات ندارد و در p های کوچک $e^{-p/2}$ نسبت می‌شود.

$$H(p) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n p^n$$

معادله دفرانسیل بر حسب $H(p)$ بدست می‌آوریم:

$$R(p) = e^{-p/2} p^l \sum_{n=0}^{\infty} a_n p^n$$

$$\frac{d^2 H}{dp^2} + \left(\frac{2l+2}{p} - 1 \right) \frac{dH}{dp} + \frac{\lambda - 1 - l}{p} H = 0$$

بجایگذاری $H(p)$ می‌کنیم

$$\sum_{n=0}^{\infty} \left[n(n-1) a_n p^{n-2} + n a_n p^{n-1} \left(\frac{2l+2}{p} - 1 \right) + (\lambda - 1 - l) a_n p^{n-1} \right] = 0$$

$$\rightarrow \sum_{n=0}^{\infty} \left\{ (n+1) [n a_{n+1} + (2l+2) a_{n+1}] + (\lambda - 1 - l - n) a_n \right\} p^{n-1} = 0$$

$$\Rightarrow \frac{a_{n+1}}{a_n} = \frac{n+l+1-\lambda}{(n+1)(n+2l+2)}$$

$\Rightarrow$ ضریب p صفر می‌شود

چون $H(p)$ به ازای n های بزرگ (دایره به p^n) سریع افزایش می‌یابد و جوابی که درمی‌یافتیم خوشه‌وار باشد بدست نمی‌آید. (سری راکت)

$$n \rightarrow \infty \Rightarrow \frac{a_{n+1}}{a_n} \sim \frac{1}{n}$$

برای حل این مشکل باید سری $H(p)$ به ازای یک n_r قطع شود

یعنی برای یک مقدار معین l به ازای یک n که آن را n_r نشان می‌دهیم دایره داریم:

$$n = n_r \rightarrow n_r + l + 1 - \lambda = 0 \Rightarrow \lambda = n_r + l + 1$$

عدد کوانتومی اصلی

n_r و l عدد های کوانتومی هستند

در نتیجه λ هم کوانتومی می‌شود.

$$n_r \geq 0$$

$$\lambda = n$$

n_r هایی که سری قطع می‌شود.

$$R(p) = p^l e^{-p/2} \sum_{n=0}^{n_r} a_n p^n$$

$$n_r \geq 0 \Rightarrow n \geq l+1 ; \quad n \rightarrow \text{عدد صحیح} ; \quad \lambda = n$$

کمترین مقدار $n \geq 1 \rightarrow l=0$

$$n = \lambda = Z\alpha \left(\frac{\mu c^2}{2|E|} \right)^{1/2} \rightarrow E_n = -\frac{1}{2} \mu c^2 \frac{(Z\alpha)^2}{n^2}$$

$n = 1, 2, 3, \dots$

اختلاف انرژی بین تراز n_i و n_f با انرژی فوتون جذب شده $(E_f - E_i)_{\text{فوتون}}$:

$$h\nu = \hbar\omega = E_f - E_i = \frac{\mu c^2 / 2\hbar}{1 + \frac{m}{\mu}} (Z\alpha)^2 \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right)$$

$$\mu = \frac{m\mu}{m + \mu}$$

$\mu \leftarrow$ جرم نوکلئون (پروتون - نوترون)
 $m \leftarrow$ جرم الکترون

تفاوت میان طیف هیدروژن و طیف دوتریم (هر دو اتم‌های هیدروژن گونه هستند) باعث کشف دوتریم توسط بورلی در سال ۱۹۳۲ شد.

$$\mu_{\text{دوتریم}} = 2m_p$$

$$\mu_{\text{هیدروژن}} = m_p$$

عدد کوانتومی $n \leftarrow$ تعیین کننده رازهای انرژی می‌باشند.

مقادیر متفاوت l انرژی‌های

$$n=2 \rightarrow l=0, 1 \quad \text{بجلی}$$

دالین طیف: $\text{ground state} \rightarrow \lambda=1 \Rightarrow n_r=0; l=0$ حالت پایه
 $R(r) = e^{-r/2} a_0$

$$\rho = \left(\frac{8\mu|E|}{\hbar^2} \right)^{1/2} r \xrightarrow{\text{یابجلی انرژی انرژی}} \rho = \frac{2\mu c Z\alpha}{n\hbar} r$$

$$E_n = -\frac{E_I}{n^2}, \quad E_I = \frac{1}{2} \mu c^2 Z^2 \alpha^2$$

$$\text{if } Z=1 \rightarrow E_I = E_{g.s} \approx \frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} \text{ MeV} \right) \frac{1}{137^2} = 13.3 \text{ eV}$$

$\mu \approx m_e$

$$\text{if } \lambda=2 \rightarrow (1) \quad l=0, n_r=1 \rightarrow m=0 \Rightarrow Y_{00}(\theta, \varphi)$$

توزیع زاویه‌ای تانگن کروی دارد

$$\frac{a_{n+1}}{a_n} = \frac{n - n_r}{(n+1)(n+2l+2)} \rightarrow$$

$$\begin{matrix} n=0 \\ n_r=1 \\ l=0 \end{matrix} \rightarrow \frac{a_1}{a_0} = \frac{-1}{2} \Rightarrow a_1 = -\frac{1}{2} a_0$$

$$R(\rho) = e^{-\rho/2} \rho^l \sum_{n=0}^{n_r} a_n \rho^n = e^{-\rho/2} (a_0 + a_1 \rho) = e^{-\rho/2} a_0 \left(1 - \frac{\rho}{2}\right)$$

$$(2) \quad l=1, n_r=0 \rightarrow m=0, \pm 1 \rightarrow Y_{1m}(\theta, \varphi)$$

توان $(2l+1)$

$$H(\rho) = a_0 \rightarrow R(\rho) = e^{-\rho/2} \rho a_0$$

$$\lambda = n=2 \rightarrow \begin{cases} l=0 \rightarrow m=0 \\ l=1 \rightarrow m=0, \pm 1 \end{cases} \Rightarrow \text{توان } \rightarrow n^2 \text{ حالت}$$

(2), (1); 1 : 1

$$\text{if } \lambda=3 \rightarrow \begin{cases} l=0 \rightarrow m=0 \\ l=1 \rightarrow m=0, \pm 1 \\ l=2 \rightarrow m=0, \pm 1, \pm 2 \end{cases} \rightarrow 3^2 = 9 \text{ حالت}$$

$$l=0 \xrightarrow{m=0} n_r=2 \Rightarrow H(\rho) = \sum_{n=0}^2 a_n \rho^n = a_0 + a_1 \rho + a_2 \rho^2$$

$$\frac{a_1}{a_0} = -1; \quad \frac{a_2}{a_1} = -\frac{1}{6} \Rightarrow H(\rho) = a_0 \left(1 - \rho + \frac{1}{6} \rho^2\right)$$

توان حالت

حالت 5

$$l=1 \rightarrow n_r=1 \Rightarrow H(r) = a_0 + a_1 r = a_0 \left(1 - \frac{r}{4}\right)$$

$m=0, \pm 1$

$$\frac{a_1}{a_0} = -\frac{1}{4}$$

حالت 5

$$l=2 \rightarrow n_r=0 \Rightarrow H(r) = a_0$$

$m=0, \pm 1, \pm 2$

+ نکته: دالتهای برای $\lambda = n$:
 $1 + 3 + 5 + \dots [2(n-1) + 1] = n^2$
 دالتهای اوج یافته شده مستقیم بیانیه $\frac{1}{r}$ است.

در این حالت بیانیه شعاعی $v(r) \propto \frac{1}{r}$ است. اثرات بیانیه $\frac{1}{r}$ داشته باشیم در مکانیک کلاسیک و مدارهای بیضوی سهمنی ثابتی در فضا دارند و حرکت تقدیمی ندارند. تغییرات کوچک در این بیانیه باعث حرکت تقدیمی شود. این تغییرات می تواند ناشی از افتادلهای از سایر سیارات در مانده کبر باشد. این حرکت تقدیمی در نظریه نسبیت عام توضیح داده شده است که بیانیه $\frac{1}{r^2}$ بیانیه نیوتونی اضافه نکرد. اثر بیانیه کوئی $\frac{1}{r}$ جمله ای مانند زیر اضافه شود

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{r} + \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{g^2}{r^2}$$

معادله شعاعی بدون تغییراتی می ماند.

جای $l(l+1)/r^2$ داریم $l^*(l^*+1) = l(l+1) + g^2 \Leftarrow l^*(l^*+1)/r^2$

$$\hookrightarrow l^* = -\frac{1}{2} + \sqrt{(l + \frac{1}{2})^2 + g^2}$$

$$E = -\frac{1}{2} \mu c^2 \frac{(Z\alpha)^2}{[n_r + \frac{1}{2} + \sqrt{(l + \frac{1}{2})^2 + g^2}]^2}$$

تجملاتی از این می رود

$\left. \begin{array}{l} n_r=1, l=2 \\ n_r=2, l=1 \end{array} \right\}$ دالتهای نسبت

در اتم هیدروژن واقعی افتادلهای کوچکی ناشی از اثرات اسپین و اثرات نسبیتی وجود دارد.

برای n معین $\leftarrow (n-1), 2, 1, 0, l$ و برای حرکت از واکشی $(2l+1)$ است
 و جذرها $n^2 \leftarrow$ چون اکترون دو حالت اسپین دارد واکشی $2n^2$

درجه تابع هارمونیک :

$$\begin{matrix} n \rightarrow k \\ \lambda \rightarrow n \end{matrix} \Rightarrow a_{k+1} = \frac{k+l+1-n}{(k+1)(k+2l+2)} a_k$$

$$a_{k+1} = (-1)^{k+1} \frac{n-(k+l+1)}{(k+1)(k+2l+2)} \cdot \frac{n-(k+l)}{k(k+2l+1)} \dots \frac{n-(l+1)}{1 \times (2l+2)} a_0$$

$$\rightarrow \boxed{H(\rho) = L_{n-1-l}^{2l+1}(\rho)} \Rightarrow \text{جذبه ای لانه}$$

$$\rho = \left(\frac{8\mu|E|}{\hbar^2} \right)^{1/2} r \rightarrow \rho = \left[\frac{8\mu}{\hbar^2} \frac{1}{2} \mu c^2 \frac{(Z\alpha)^2}{n^2} \right]^{1/2} r = \frac{2\mu c Z\alpha}{n\hbar} r$$

$$\text{if } a_0' = \frac{\hbar}{\mu c \alpha} \Rightarrow \boxed{\rho = \frac{2Z}{na_0'} r} \rightarrow n=1 \Rightarrow \rho = \frac{2Z}{a_0'} r$$

$$n=1 \quad R_{10}(\rho) = e^{-\rho/2} a_0 \Rightarrow R_{10}(r) = e^{-\frac{Zr}{a_0'}} a_0$$

$$\int |\psi(r, \theta, \phi)|^2 r^2 dr d\Omega = 1 \quad 0.52 \text{ \AA} \leftarrow \text{شعاع اولین حالت مجاز برای هیدروژن}$$

$$\int |R_{10}(r)|^2 r^2 dr = 1 \Rightarrow a_0'^2 \int_0^\infty e^{-\frac{2Zr}{a_0'}} r^2 dr = 1$$

$$R_{10}(r) = 2 \left(\frac{Z}{a_0'} \right)^{3/2} e^{-Zr/a_0'}$$

$$R_{20}(r) = 2 \left(\frac{Z}{2a_0'} \right)^{3/2} \left(1 - \frac{Zr}{2a_0'} \right) e^{-Zr/2a_0'}$$

$$R_{21}(r) = \frac{1}{\sqrt{3}} \left(\frac{Z}{2a_0'} \right)^{3/2} \frac{Zr}{a_0'} e^{-Zr/2a_0'}$$

⋮

ویژگی‌های کلفی:

۱) در اتم هیدروژن در مبدأ پتانسیل نزدیک است و الکترون همان‌های زیادی در نزدیکی هسته می‌باشد ولی الکترون با l (نسبت زاویه‌ای) نزدیک دور از هسته خواهد بود.

r^l (برای مقدار کوچک r ، تابع موج با افزایش l کوچک می‌ماند) یعنی احتمال حضور ذره در r کوچک کم می‌شود. در واقع باید و خود به خود مرکز نیرو را دفعه‌ای است که الکترون‌ها را از نزدیک شدن به هسته باطنی دارد.

۲) برای n, l مشخص تابع در n, l نقطه (ثله) محور r را قطع می‌کند. از این رو n, l ثله (صفحه شعاعی) دارد.

توزیع چگالی احتمال $P(r, \theta, \phi) dV = | \Psi_{nlm} |^2 dV$

$$P dV = | R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \phi) |^2 r^2 dr d\Omega = \underbrace{| R_{nl}(r) |^2 r^2 dr}_{\text{احتمال اینکه الکترون در فاصله } r \text{ تا } r+dr \text{ باشد}} \underbrace{| Y_{lm}(\theta, \phi) |^2 d\Omega}_{\text{چگالی احتمال زاویه‌ای وابسته به سمت}}$$

چگالی احتمال شعاعی $\underline{P(r) = r^2 | R_{nl} |^2}$

چگالی احتمال وابسته به زمان نیست. اثر الکترون را به صورت توزیع بار حول هسته در نظر بگیریم جایی که دانسته تابع زیاد، اثر غلظت بیشتر دارد و بالعکس و غلظت اثر بارها را تغییر نمی‌کند.

if $n_r = 0 \rightarrow$ تعداد نقاط به صفر است $\rightarrow$ مقدار r قطع نمی کند $\rightarrow n=1, l=0 \rightarrow$ یک گره بزرگ

$$u(r) = rR(r)$$

$$n_r = n - l - 1$$

$$n=2, l=0, 1$$

برای $n=2$ و $l=1$ یک گره بزرگ

$$n=3, l=0, 1, 2$$

برای $n=3$ و $l=2$ یک گره بزرگ

تعداد گره ها: $n_r + 1 \leq n - l$ می باشد.

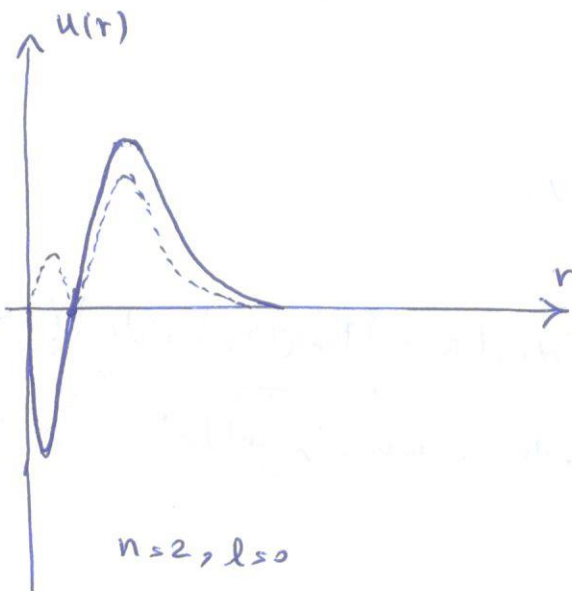
$$n=2 \rightarrow l=0, l=1$$

$$n_r=1$$

$$n_r=0$$

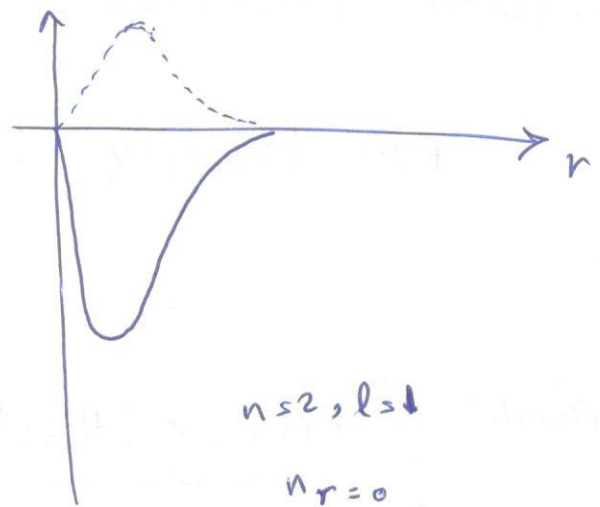
برای حالتی که $l = n-1$ است یک گره بزرگ وجود دارد که همان شعاع اتمی بود، از آن پس مقدار n به دست می آید.

$$P_{n,n-1} = |R_{n,n-1}(r)|^2 r^2$$



$$n=2, l=0$$

$$n_r=1$$



$$n=2, l=1$$

$$n_r=0$$

$$P_{n,n-1} = |R_{n,n-1}(r)|^2 r^2 \propto r^{2n} e^{-\frac{2Zr}{a_0 n}}$$

$$R_{n,n-1}(r) \propto r^{n-1} e^{-\frac{Zr}{a_0 n}}$$

$$\Rightarrow \frac{dP(r)}{dr} = \left\{ 2nr^{2n-1} - \frac{2Z}{a_0 n} r^{2n} \right\} e^{-\frac{2Zr}{a_0 n}} = 0$$

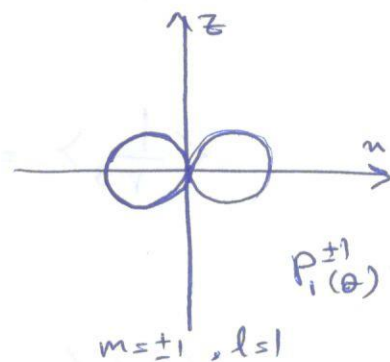
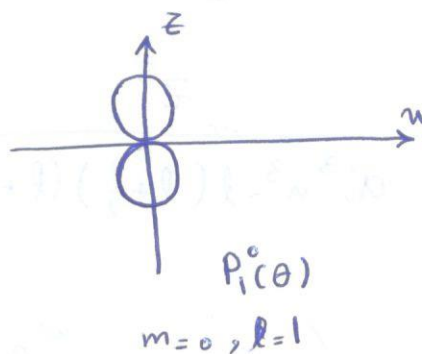
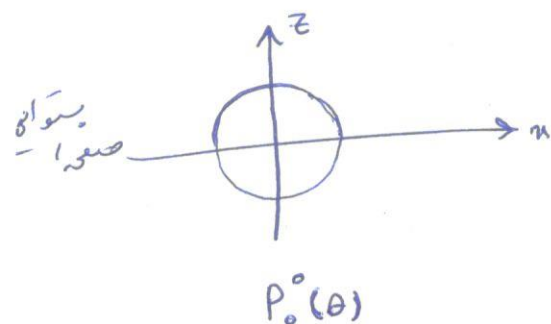
$$\rightarrow \boxed{r = \frac{n^2 a_0}{Z}}$$

نقطه اتم تور برای مدارهای دایره‌ای

برای مقادیر l کوچکتر برآیندهای بهتری شود.

۳) صنعت زائده‌ای تابع زوج :

$$P_l^m(\cos\theta) \rightarrow [P_l^m(\cos\theta)]^2 \rightarrow \text{صفاً اصفال}$$



با افزایش m صفاً اصفال از محور z به سمت صفاً استوانه‌ای منتقل می‌شود.

(د) راستن نوابغ موج می توان مقدار حسدائی r^k را بدست آورد :

$$\langle r^k \rangle = \int_0^\infty dr r^{2+k} [R_{nl}(r)]^2$$

$$\rightarrow \langle r \rangle = \frac{a_0'}{2Z} [3n^2 - l(l+1)]$$

$$\langle r^2 \rangle = \frac{a_0'^2 n^2}{2Z^2} [5n^2 + 1 - 3l(l+1)]$$

$$\langle \frac{1}{r} \rangle = \frac{Z}{a_0' n^2}$$

$$\langle \frac{1}{r^2} \rangle = \frac{Z^2}{a_0'^2 n^3 (l + \frac{1}{2})}$$

$$\langle \frac{1}{r^3} \rangle = \frac{Z^3}{a_0'^3 n^3 l(l + \frac{1}{2})(l+1)}$$

در حالت $l=0$ جواب های معادله شرودینر برای تیانین کونی $\frac{1}{r}$ در برابری انرژی اکسرون (مادی و پون) سردکار داریم.