

## บทที่ 10

### อะตอมไฮโดรเจน

ในบทนี้จะกล่าวถึงสมการชเรอดิงเงอร์ของอิเล็กตรอนในอะตอมไฮโดรเจน อิเล็กตรอน ถูกจับติดกับโปรตอนด้วยแรงคูลอมบ์ พลังงานศักย์  $V(r) = -\frac{Ze^2}{r}$  จะแทนแรงคูลอมบ์ระหว่างนิวเคลียสที่มีประจุ  $+Ze$  กับอิเล็กตรอนประจุ  $-e$

#### 10.1 สมการคลื่นของอะตอมไฮโดรเจน

สมการคลื่นที่เราใช้มาก่อนหน้านี้จะเป็นสมการที่ถูกพัฒนาขึ้นมาสำหรับอนุภาคเดี่ยว ภายใต้อิทธิพลของแรงภายนอก อย่างไรก็ตามสำหรับอนุภาคคู่ (นิวเคลียสกับอิเล็กตรอน) ซึ่งดึงดูดซึ่งกันและกันด้วยแรงคูลอมบ์ สมการชเรอดิงเงอร์ สำหรับอนุภาค 2 ตัว  $m_1$  และ  $m_2$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x_1, y_1, z_1, x_2, y_2, z_2) = \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_1^2} \right) - \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_2^2} \right) \right] \psi(x_1, y_1, z_1, x_2, y_2, z_2, t) + V(x_1, y_1, z_1, x_2, y_2, z_2, t)$$

ถ้าพลังงานศักย์ขึ้นกับพิกัดสัมพัทธ์

$$V = V(x_1 - x_2, y_1 - y_2, z_1 - z_2)$$

พิกัดของจุดศูนย์กลางมวล  $X, Y, Z$

$$x = x_1 - x_2$$

$$y = y_1 - y_2$$

$$z = z_1 - z_2$$

$$MX = m_1x_1 + m_2x_2 \quad MY = m_1y_1 + m_2y_2 \quad MZ = m_1z_1 + m_2z_2$$

เมื่อ  $M = m_1 + m_2$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = \left[ -\frac{\hbar^2}{2M} \left( \frac{\partial^2}{\partial X_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial Y_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial Z_1^2} \right) - \frac{\hbar^2}{2\mu} \left( \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_2^2} \right) + V(x, y, z, t) \right] \psi$$

เมื่อ  $\mu = \frac{m_1m_2}{m_1 + m_2}$  คือ มวลลดทอน (reduced mass)

อาศัยวิธีการแยกตัวแปร

$$\Psi(x, y, z, X, Y, Z, t) = u(x, y, z)U(X, Y, Z)e^{-iEt/\hbar}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 u + Vu = Eu$$

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \nabla^2 U = EU$$

### คุณสมบัติระยะไกล

จากการ วิธีการแยกตัวแปรจะได้สมการขึ้นกับรัศมี

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{r} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{dR}{dr} \right) - \frac{Ze^2}{r} R + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} R = ER$$

ให้  $\rho = \alpha r$  จะได้

$$\frac{1}{\rho^2} \frac{d}{d\rho} \left( \rho^2 \frac{dR}{d\rho} \right) + \left[ \frac{\lambda}{\rho} - \frac{1}{4} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right] R = 0 \quad \dots\dots\dots(10.1)$$

โดยที่  $\alpha$        $\alpha = \frac{Z\mu|E|}{\eta^2}$        $\lambda = \frac{2\mu Ze^2}{\alpha\eta^2} = \frac{Ze^2}{\eta} \left( \frac{\mu}{s|E|} \right)^{1/2}$  .....(10.2)

$R(\rho)$  ในบริเวณห่างไกล  $\rho \rightarrow \infty$

$$R(\rho) = \rho^n e^{\pm \frac{1}{2}\rho}$$

ผลเฉลยควรจะอยู่ในรูป

$$R(\rho) = F(\rho)e^{-\frac{1}{2}\rho} \text{ .....(10.3)}$$

เมื่อ  $F(\rho)$  เป็นพหุนาม

แทนสมการ (10.3) ลงในสมการ (10.1) จะได้

$$F'' + \left(\frac{2}{\rho} - 1\right)F' + \left[\frac{\lambda - 1}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2}\right]F = 0 \text{ .....(10.4)}$$

ระดับพลังงาน

ผลเฉลยของ F จะอยู่ในรูป

$$F(\rho) = \rho^s (a_0 + a_1\rho + a_2\rho^2 + \dots) = \rho^s L(\rho) \quad a_0 \neq 0, s \geq 0 \text{ .....(10.5)}$$

แทนสมการ (10.5) ลงในสมการ (10.4) จะได้

$$\rho^2 L'' + \rho[2(s+1) - \rho]L' + [\rho(\lambda - s - 1) + s(s+1) - l(l+1)]L = 0 \text{ .....(10.6)}$$

ถ้า  $\rho = 0$  จะได้

$$s(s+1) - l(l+1) = 0$$

รากของสมการคือ  $s = l$  และ  $s = -(l+1)$

$R(\rho)$  จะต้องจำกัดที่  $\rho = 0$  ทำให้  $s = l$

จะได้สมการของ L

$$\rho L'' + [2(s+1) - \rho]L' + [(\lambda - l - 1)]L = 0$$

แก้สมการนี้โดยแทน L ในรูปของอนุกรม

ความสัมพันธ์ระหว่างสัมประสิทธิ์คือ

$$a_{v+1} = \frac{v + l + 1 - \lambda}{(v + 1)(v + 2l + 2)} a_v$$

อนุกรมของ L ต้องมีจุดสิ้นสุด

ให้  $\rho$  ยกกำลังสูงสุดเท่ากับ  $\rho^{n'} (n' \geq 0)$

เราเลือก  $\lambda = n$  ซึ่ง  $\lambda = n = n' + l + 1$

$n'$  เรียกว่าเลขควอนตัมรัศมี ( radial quantum number)

$n$  เรียกว่าเลขควอนตัมรวม ( total quantum number)

จากสมการ (10.2) จะได้ค่าของพลังงาน

$$E_n = -\frac{\mu Z^2 e^4}{2\eta^2 n^2}$$

## 10.2 พหุนามลาแก (Laguerre polynomials)

ผลเฉลยซึ่ง  $\lambda = n$  อาจเขียนในเทอมของพหุนามลาแก  $L_n(\rho)$  ซึ่งนิยามในเทอมของฟังก์ชันก่อกำเนิด

$$u(\rho, s) = \frac{e^{-\rho s(1-s)}}{1-s} = \sum_{q=0}^{\infty} \frac{L_q(\rho)}{q!} s^q \quad s < 1 \quad \dots\dots\dots(10.6)$$

หาอนุพันธ์เทียบกับ  $\rho$  และ  $s$  จะได้ความสัมพันธ์คล้ายกับพหุนามเออมีต สำหรับพหุนามลาแก

$$L'_q - qL'_{q-1} = -qL_{q-1}$$

$$L_{q+1} = (2q + 1 - \rho)L_q - q^2L_{q-1}$$

สมการดิฟเฟอเรนเชียลอันดับต่ำสุดจะเกี่ยวข้องกับ  $L_q$  อย่างเดียว

$$\rho L''_q + (1 - \rho)L'_q + qL_q = 0 \quad \dots\dots\dots(10.7)$$

นิยาม พหุนามแอสโซซิเอทเลอจอง

$$L_q^p(\rho) = \frac{d^p}{d\rho^p} L_q(\rho)$$

หาอนุพันธ์ของสมการ (10.7)  $p$  ครั้ง จะพบว่า  $L_q^p(\rho)$  เข้ากันได้พอดีกับสมการ

$$\rho L_q^{p'} + (p + 1 - \rho)L_q^{p'} + (q - p)L_q^p = 0$$

ผลเฉลย เป็น พหุนามแอสโซซิเอทเลอจอง

$$L_{n+l}^{2l+1}(\rho) \quad \text{ซึ่งมีอันดับ } (n + l) - (2l + 1) = n - l - 1$$

หาอนุพันธ์ของสมการ (10.6)  $p$  ครั้งเทียบกับ  $\rho$  จะได้ฟังก์ชันทั่วไปของพหุนามแอสโซซิเอทเลกาแก

$$u_p(\rho, s) = \frac{(-s)^p e^{-\rho s(1-s)}}{(1-s)^{p+1}} = \sum_{q=p}^{\infty} \frac{L_q^p(\rho)}{q!} s^q \quad \dots\dots\dots(10.8)$$

จะได้

$$L_{n+l}^{2l+1}(\rho) = \sum_{k=0}^{n-l-1} \frac{[(n+l)!]^2 \rho^k}{(n-l-1-k)!(2l+1+k)!k!}$$

พิสูจน์ได้โดยการแทนลงในสมการ (10.8)

### 10.3 ฟังก์ชันคลื่นของอะตอมไฮโดรเจน (Hydrogen-atom wave function )

ฟังก์ชันคลื่นที่ขึ้นกับรัศมี จะอยู่ในรูป  $e^{-\frac{1}{2}\rho} \rho^l L_{n+l}^{2l+1}(\rho)$

ค่าคงที่การนอร์มัลไลซ์ หาได้จาก ฟังก์ชันก่อกำเนิดโดยการคำนวณอินทิเกรต

$$\int_0^{\infty} e^{-\rho} \rho^{2l} [L_{n+l}^{2l+1}(\rho)]^2 \rho^2 d\rho = \frac{2n [(n+l)!]^3}{(n-l-1)!}$$

ดังนั้น ไอเกนฟังก์ชันที่นอร์มัลไลซ์แล้ว ของอะตอมไฮโดรเจนคือ

$$u_{nlm}(r, \theta, \phi) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \phi)$$

$$R_{nl}(r) = - \left\{ \left( \frac{2Z}{na_0} \right)^{1/2} \frac{(n-l-1)!}{2n [(n+l)!]^3} \right\}^{1/2} e^{-\frac{1}{2}\rho} \rho^l L_{n+l}^{2l+1}(\rho)$$

เมื่อ  $a_0 = \frac{\hbar^2}{\mu e^2} \quad \rho = \frac{2Z}{na_0} r$

โดยที่  $Y_{lm}(\theta, \phi)$  เป็น ฮาร์มอนิกทรงกลมที่นอร์มัลไลซ์แล้ว

ระดับพลังงาน

$$E_n = -\frac{Z^2 e^2}{2a_0 n^2}$$

ตัวอย่าง ฟังก์ชันในแนวรัศมี

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

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

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

## 10.4 สรุพอะตอมไฮโดรเจน

อะตอมไฮโดรเจนประกอบด้วยโปรตอนมวล  $m_p = 1.67 \times 10^{-27} \text{ kg}$  และประจุ  $e = 1.6 \times 10^{-19} \text{ C}$  และอิเล็กตรอนมวล  $m_e = 0.91 \times 10^{-30} \text{ kg}$  และมีประจุเท่ากับโปรตอน อันตรกิริยาระหว่างอนุภาคทั้งสองเป็นแรงระหว่างประจุไฟฟ้าและพลังงานศักย์คือ

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

เมื่อ  $r$  เป็นระยะห่างระหว่างอนุภาคทั้งสอง มวลลดทอนคือ

$$\mu = \frac{m_e m_p}{m_e + m_p} \cong m_e \left(1 - \frac{m_e}{m_p}\right)$$

จุดศูนย์กลางมวลของระบบใกล้กับโปรตอน สถานะของระบบจะอยู่ในรูป

$$Y_{nlm}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{r} u_{nl}(r) Y_l^m(\theta, \phi)$$

รัศมีของบอห์ร  $a_0 = \frac{\hbar^2}{\mu e^2} \cong 0.52 \text{ \AA}$

พลังงานไอออไนเซชันของอะตอมไฮโดรเจน

$$E_1 = \frac{\mu e^4}{2\hbar^2} \cong 13.6 \text{ eV}$$

การแก้สมการเชิงรัศมีของอะตอมไฮโดรเจน เราให้

$$\rho = \frac{r}{a_0} \quad \text{และ} \quad \lambda_{kl} = \sqrt{-E_{kl} / E_1} \quad \text{จะได้}$$

$$\left[ \frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} + \frac{2}{\rho} - \lambda_{kl}^2 \right] u_{kl}(\rho) = 0$$

เปลี่ยนดัชนีจาก n เป็น k โดยที่  $n = k+l$  คำตอบของสมการคือ

$$u_{kl}(\rho) = e^{-\rho\lambda_{kl}} \xi_{kl}(\rho)$$

เมื่อ  $\xi_{kl}(\rho) = \rho^s \sum_{q=0}^{\infty} C_q \rho^q$

สัมประสิทธิ์  $C_q$  หาได้จากความสัมพันธ์แทนค่าย้อนกลับ (recursion relation)



$$C_q = (-1)^q \left( \frac{2}{k+1} \right)^q \frac{(k-l)!(2l+1)!}{(k-q-1)!q!(q+2l+1)} C_0$$

ผลเฉลยสำหรับ  $R_{nl}(\rho)$  สามารถเขียนในรูป

$$R_{nl}(\rho) = -\sqrt{\left( \frac{2}{na_0} \right)^3 \frac{(n-l-1)}{2n[(n+1)!]^3}} e^{-\rho/2} \rho^l L_{n+l}^{2l+1}(\rho)$$

**ตัวอย่างที่ 10.1 ก)** จงเขียนสมการค่าไอเกนของอนุภาคที่อยู่ภายใต้แรงสู่ศูนย์กลาง  $V(r)$  และอาศัยวิธีการแยกตัวแปรของฟังก์ชันคลื่นเพื่อหา สมการรัศมีและสมการมุม 2 สมการ

ข) แก่สมการรัศมีสำหรับศักย์ของอะตอมไฮโดรเจน  $V(r) = -\frac{e^2}{r}$

**วิธีทำ**

ก) แฮมิลโทเนียนของระบบคือ

$$H = -\frac{\eta^2}{2\mu} \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2}(r) + \frac{L^2}{2\mu r^2} + V(r)$$

ซึ่งจะได้สมการค่าไอเกน ว่า

$$\left[ -\frac{\eta^2}{2\mu} \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2}(r) + \frac{L^2}{2\mu r^2} + V(r) \right] \Psi(r, \theta, \phi) = E\Psi(r, \theta, \phi)$$

$H, L^2, L_z$  จะเป็นชนิดสลับที่ ดังนั้นเราสามารถหาฟังก์ชัน  $\Psi(r, \theta, \phi)$  ซึ่งเป็นฟังก์ชันไอเกนของ  $L^2, L_z$

$$H\Psi(r, \theta, \phi) = E\Psi(r, \theta, \phi)$$

$$L^2\Psi(r, \theta, \phi) = l(l+1)\eta^2\Psi(r, \theta, \phi)$$

$$L_z\Psi(r, \theta, \phi) = m\eta\Psi(r, \theta, \phi)$$

เนื่องจาก

$$L^2 = -\eta^2 \left( \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{1}{\tan \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right)$$

และ  $L_z = -i\eta \frac{\partial}{\partial \phi}$  ดังนั้น

$$-\eta^2 \left( \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{1}{\tan \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) \Psi(r, \theta, \phi) = l(l+1)\Psi(r, \theta, \phi)$$

และ

$$-i \frac{\partial \Psi(r, \theta, \phi)}{\partial \phi} = m\Psi(r, \theta, \phi)$$

$$\Psi(r, \theta, \phi) = R(r)Y_l^m(\theta, \phi)$$

ได้

$$\left[ -\frac{\eta^2}{2\mu r} \frac{d^2}{dr^2}(r) + \frac{l(l+1)\eta^2}{2\mu r^2} + V(r) \right] R(r) = ER(r)$$

และ

$$\left( -\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{1}{\tan \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) Y_l^m(\theta, \phi) = l(l+1)Y_l^m(\theta, \phi)$$

$$-i \frac{\partial}{\partial \phi} Y_l^m(\theta, \phi) = m Y_l^m(\theta, \phi)$$

เป็นสมการรัศมีและสมการมุม

$$Y_l^m(\theta, \phi) = G_l^m e^{im\phi}$$

ข) เราเขียนสมการ รัศมีในรูป

$$\left[ -\frac{\eta^2}{2\mu} \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2}(r) + \frac{l(l+1)\eta^2}{2\mu r^2} + V(r) \right] R_{kl}(r) = E_{kl} R_{kl}(r)$$

กำหนดให้  $u_{kl}(r) = rR_{kl}(r)$  จะได้

$$\left[ -\frac{\eta^2}{2\mu} \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2}(r) + \frac{l(l+1)\eta^2}{2\mu r^2} + V(r) \right] u_{kl}(r) = E_{kl} u_{kl}(r)$$

กำหนดให้ศักย์ยังผล (effective potential)

$$V_{eff} = V(r) + \frac{l(l+1)\eta^2}{2\mu r^2}$$

มีลักษณะเหมือนโจทย์ 1 มิติของอนุภาคมวล  $\mu$  เคลื่อนที่ภายใต้ศักย์  $V_{eff}$

กำหนดให้

$$E_l = \frac{\mu e^4}{2\eta^2} \qquad a_0 = \frac{\eta^2}{\mu e^2}$$

$$\lambda_{kl} = \sqrt{-\frac{E_{kl}}{E_l}} \qquad \rho = \frac{r}{a_0}$$

จะได้

$$\left[ \frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} + \frac{2}{\rho} - \lambda_{kl}^2 \right] u_{kl}(\rho) = 0$$

กำหนดให้

$$u_{kl}(\rho) = e^{-\rho\lambda_{kl}} \xi_{kl}(\rho)$$

จะได้

$$\left[ \frac{d^2}{d\rho^2} - 2\lambda_{kl} \frac{d}{d\rho} + \left( \frac{2}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right) \right] \xi_{kl}(\rho) = 0$$

เงื่อนไขขอบเขต

$\xi_{kl}(0) = 0$  และกระจาย  $\xi_{kl}(\rho)$  ในรูปอนุกรมของ  $\rho$

$\xi_{kl}(\rho) = \rho^s \sum_{q=0}^{\infty} C_q \rho^q$  เมื่อ  $C$  เป็นสัมประสิทธิ์ของเทอมแรกที่ไม่เท่ากับศูนย์ ดังนั้น

$$\frac{d\xi_{kl}(\rho)}{d\rho} = \sum_{q=0}^{\infty} (q+s) C_q \rho^{q+s-1}$$

และ

$$\frac{d^2 \xi_{kl}(\rho)}{d\rho^2} = \sum_{q=0}^{\infty} (q+s)(q+s-1) C_q \rho^{q+s-2}$$

จะได้อนุกรมทางซ้ายและศูนย์ทางขวา ดังนั้นสัมประสิทธิ์ของ  $\rho$  ยกกำลังต่างๆเท่ากับศูนย์

ให้

$$R_{kl}(r) \xrightarrow{r \rightarrow 0} Cr^s$$

จะได้

$$l(l+1) - s(s+1) = 0$$

ซึ่ง  $s = l$  หรือ  $s = -(l+1)$  สำหรับค่า  $E_{kl}$  จะมีคำตอบ 2 ค่าที่จุดกำเนิดจะแปรตาม  $r^2$  และ

$$\frac{1}{r^{l+1}} \text{ สามารถพิสูจน์ได้ว่า } \left(\frac{1}{r^{l+1}}\right) Y_l^m(\theta, \phi) \text{ ไม่ใช่คำตอบเมื่อ } r = 0$$

ผลเฉลยของสมการจะเข้าใกล้ศูนย์ที่จุดกำเนิดทุกค่า  $l$  เพราะว่า

$$u_{kl}(r) \xrightarrow{r \rightarrow 0} Cr^{l+1}$$

ดังนั้นเงื่อนไขขอบเขต  $u_{kl}(0) = 0$

อนุกรมเทอมต่ำสุดเทียบสัมประสิทธิ์

$$[-i(l+1) + s(s-1)]C_0 = 0$$

เนื่องจาก  $C_0 \neq 0$  จะได้  $s = -l$  หรือ  $s = l+1$

กำหนดให้สัมประสิทธิ์ของเทอม  $\rho^{q+s-2}$  เท่ากับศูนย์ (สำหรับ  $s = l+1$ ) จะได้

สมการแทนค่าย้อนกลับ

$$q(q+2l+1)C_q = 2[(q+l)\lambda_{kl} - 1]C_{q-1}$$

ดังนั้น ถ้ารู้ค่า  $C_0$  เราสามารถคำนวณ  $C_1$  และอื่นๆได้ เนื่องจาก

$\frac{C_q}{C_{q-1}} \rightarrow 0$  เมื่อ  $q \rightarrow \infty$  อนุกรมจะลู่เข้าทุกๆค่าของ  $\rho$  เราสามารถพิสูจน์ได้ว่า

$$C_q = (-1)^q \left( \frac{2}{k+l} \right)^q \frac{(k-l)!}{(k-q-1)!} \frac{(2l+1)!}{(q+2l+1)!} C_0$$

เมื่อ  $C_0$  หาได้จากการนอร์มัลไลซ์

$$\int_{-\infty}^{\infty} r^2 |R_{kl}(r)|^2 dr = \int_{-\infty}^{\infty} |u_k(r)|^2 dr$$

**ตัวอย่างที่ 10.2** ฟังก์ชันคลื่นของอิเล็กตรอนในอะตอมที่คล้ายไฮโดรเจนคือ  $\Psi(r) = Ce^{-r/a}$  เมื่อ

$$a = a_0 / z \quad a_0 = 0.5 \text{ \AA} \quad \text{เป็นรัศมีของบอร์}$$

- ก) จงคำนวณค่าคงที่ของการนอร์มัลไลซ์
- ข) ถ้าเลขนิวเคลียสคือ  $A = 173$  และ  $z = 70$  จงหาความน่าจะเป็นที่อิเล็กตรอนจะอยู่ในนิวเคลียส สมมติว่ารัศมีของนิวเคลียส  $= 1.2A^{1/3} \text{ fm}$
- ค) จงหาความน่าจะเป็นที่อิเล็กตรอนจะอยู่ในบริเวณ  $x, y, z > 0$

วิธีทำ

ก) 
$$\iiint \Psi^* \Psi d^3r = 1$$

$$C^2 \int_0^{\infty} r^2 e^{-2r/a} dr \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\pi} \sin \theta d\theta = 4\pi C^2 \int_0^{\infty} r^2 e^{-2r/a} dr = 1$$

เนื่องจาก

$$\int_0^{\infty} r^2 e^{-2r/a} dr = \left(\frac{a}{2}\right)^3 \Gamma(3)$$

$$= \left(\frac{a}{2}\right)^3 2! = \frac{a^3}{4}$$

ดังนั้น

$$C = \left(\frac{1}{4\pi} \frac{4}{a^3}\right)^{1/2} = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}}$$

ข) ความน่าจะเป็นที่จะพบอิเล็กตรอนภายในนิวเคลียสคือ

$$P = \int_0^R r^2 |\Psi(r)|^2 dr \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\pi} \sin \theta d\theta = 4\pi C^2 \int_0^R r^2 e^{-2r/a} dr$$

เนื่องจาก R มีค่าน้อยมากเมื่อเทียบกับ a เราสามารถคิดว่า  $|\Psi|^2$  มีค่าคงที่ภายในนิวเคลียส เพราะ  $e^{-2r/a} \approx e^{-2R/a} \approx 1$  ดังนั้น

$$P = \frac{4}{a^3} \int_0^R r^2 dr = \frac{4}{3} \left(\frac{R}{a}\right)^3 = \frac{4}{3} \left(\frac{zr_0}{a_0}\right)^3 A = 1.1 \times 10^{-8}$$

**โปรแกรมคำนวณและเขียนกราฟฟังก์ชันคลื่นของอะตอมไฮโดรเจน คือ**

```
% this program calculates and plots hydrogen-like wave functions.
% There are three parameters n, l, and m, which must satisfy n>l>=m

clear all;

n=input('Input quantum number n = ');
l=input('Input quantum number l (n>l>=0) = ');
m=input('Input quantum number m (l>=|m|) = ');
```

```

if ((abs(m) > 1)|(l>n)) %check if n>l>=m
    err='Wrong input parameter value!'
    return;
end

npoints = 101; % number of points
rslv = 401; % the angle resolution for 3D drawing, it is
2*pi/(rslv-1)

Z = 1; % value ion core charge, Z=1 for H, Z=2 for He+,
etc.

%*****
% to draw the radial functions |Rnl(r)|^2 and |Rnl(r)|
% we scan from r/a_B = 0 to 30, then select r=2a_B
% to draw the orbitals, where a_B is the Bohr
% radius
%=====
% Calculate the Laguerre Polynomial value L in function
% LaguerreT: the corresponding symbols are:
% L: Laguerre Polynomial L
% ro: the parameter ro in L
% n: the parameter n in L
% k: the parameter k in L
%=====
for i=1:npoints
    r(i)=(i-1)*30/npoints;
    ro(i) = r(i)*2*Z/n;
    L(i) = LaguerreT(n,l,ro(i));
    const=-((2*Z)/n)^(3/2);
    const=const*((factorial(n-l-
1))/(2*n*((factorial(n+l))^3))^0.5);
    Rnl(i)=const*(exp(-ro(i)/2))*(ro(i)^l)*L(i);
    Rnl2(i)=(r(i)^2)*(Rnl(i)^2);
end

figure(1);
subplot(2,1,1);
plot(r,Rnl,'r');
xlabel('Position, r/a_B');ylabel('R_{nl} radial wave function');
ttl2=['R_{nl}, n=',num2str(n),', l=',num2str(l),', Z=',num2str(Z)];
title(ttl2);
subplot(2,1,2);
plot(r,Rnl2,'r');
xlabel('Position, r/a_B');ylabel('|R_{nl}|^2 radial wave function
squared');
ttl3=['4\pi r^2 dr |R_{nl}|^2, n=',num2str(n),', l=',num2str(l),',
Z=',num2str(Z)];
title(ttl3);

```



```

%=====
% multiply the radial function Rnl with the spherical harmonics to
% generate electron density, 3 figures are drawn in the code below,
% figure(2) is the square of the atomic orbital shape
% figure(3) and (4) correspond to the real and imaginary
% part of the atomic orbitals
%=====
t=1; % make sure the radius is not zero
if Rnl(t)==0 % if the selected Rnl(1) is zero
    t=t+1; % use Rnl(2)
end

U = linspace(0, 2*pi, rslv); % Phi in the spherical coordinates
V = linspace(0, 2*pi, rslv); % Theta in the spherical coordinates
[u,v] = meshgrid(U,V);
%=====
factor1=factorial(1-m);
factor2=factorial(1+m);
a=(2*1+1)*factor1/(4*pi*factor2);
a=a*abs(Rnl(t));

pp=legendre(1,cos(v));

if (l == 0)
    gs = a.*pp;
else
    plm=pp(abs(m)+1,:);
    tt=1;
    for k1=1:rslv
        for k2=1:rslv
            gs(k2,k1) = a*plm(tt)^2;
            tt=tt+1;
        end;
    end
end
gsr = (gs.^0.5).*cos(m*u);
gsi = (gs.^0.5).*sin(m*u);
%=====
% Spherical
X=cos(u).*sin(v).*gs;
Y=sin(u).*sin(v).*gs;
Z=cos(v).*gs;
% the following code figures out the maximim
% coordinate value and then puts it as the range of all
% three coordinates X, Y and Z when drawing the figure.
% The same code is reused in drawing the real and
% imaginary part figures

```

```

xmax = 0;
ymax = 0;
zmax = 0;
tmp=max(X,[],1);
xmax=max(tmp);

tmp=max(Y,[],1);
ymax=max(tmp);

tmp=max(Z,[],1);
zmax=max(tmp);

amax = max([xmax ymax zmax]);
amaxn= amax*(-1.0);
%=====
figure(2);
surf(X,Y,Z,'FaceColor','m','EdgeColor','none')
xlabel('X');
ylabel('Y');
zlabel('Z');
camlight left; lighting phong;
ttl=['|\psi(' ,num2str(n),num2str(l),num2str(m),')|^2'];
title(ttl);
axis([amaxn amax amaxn amax amaxn amax]);
if (m == 0)
    return;
end
%=====
% the following code draws the real part and the imaginary
% part of the spherical harmonic associated with the state.
% If you don't want to draw them, just return here
%return;
%=====
% Real part
Xr=cos(u).*sin(v).*gsr;
Yr=sin(u).*sin(v).*gsr;
Zr=cos(v).*gsr;

xrmax = 0;
yrmax = 0;
zrmax = 0;
tmp=max(Xr,[],1);
xrmax=max(tmp);

tmp=max(Yr,[],1);
yrmax=max(tmp);

tmp=max(Zr,[],1);
zrmax=max(tmp);

```

```

armax = max([xrmax yrmax zrmax]);
armaxn= armax*(-1.0);

figure(3);
surf(Xr,Yr,Zr,'FaceColor','m','EdgeColor','none')
xlabel('X');
ylabel('Y');
zlabel('Z');
camlight left; lighting phong
ttl2=['Real \psi, n=',num2str(n),', l=',num2str(l),',
m=',num2str(m)];
title(ttl2);
axis([armaxn armax armaxn armax armaxn armax]);
%=====
% Imaginary part
Xi=cos(u).*sin(v).*gsi;
Yi=sin(u).*sin(v).*gsi;
Zi=cos(v).*gsi;

ximax = 0;
yimax = 0;
zimax = 0;
tmp=max(Xi,[],1);
ximax=max(tmp);

tmp=max(Yi,[],1);
yimax=max(tmp);

tmp=max(Zi,[],1);
zimax=max(tmp);

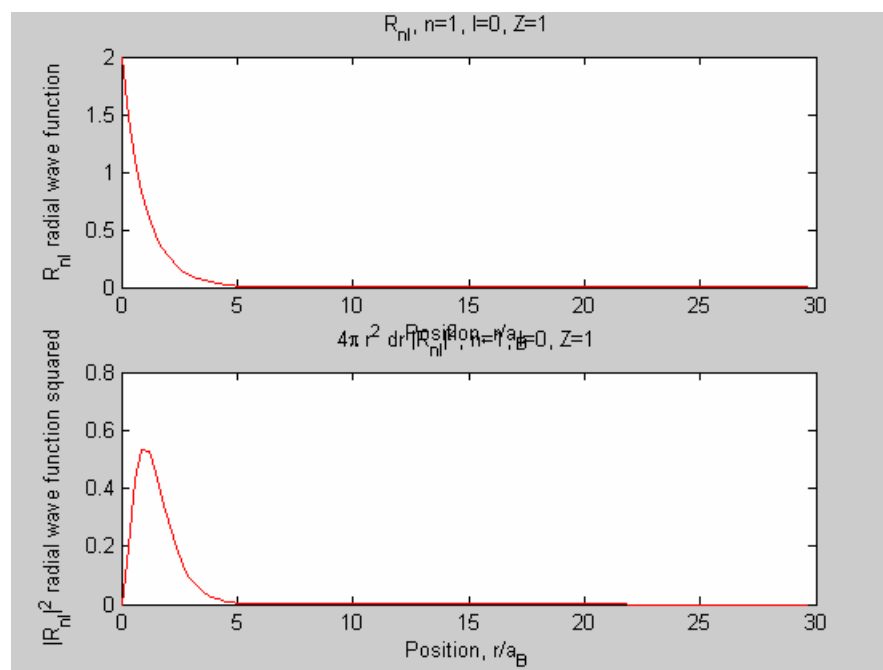
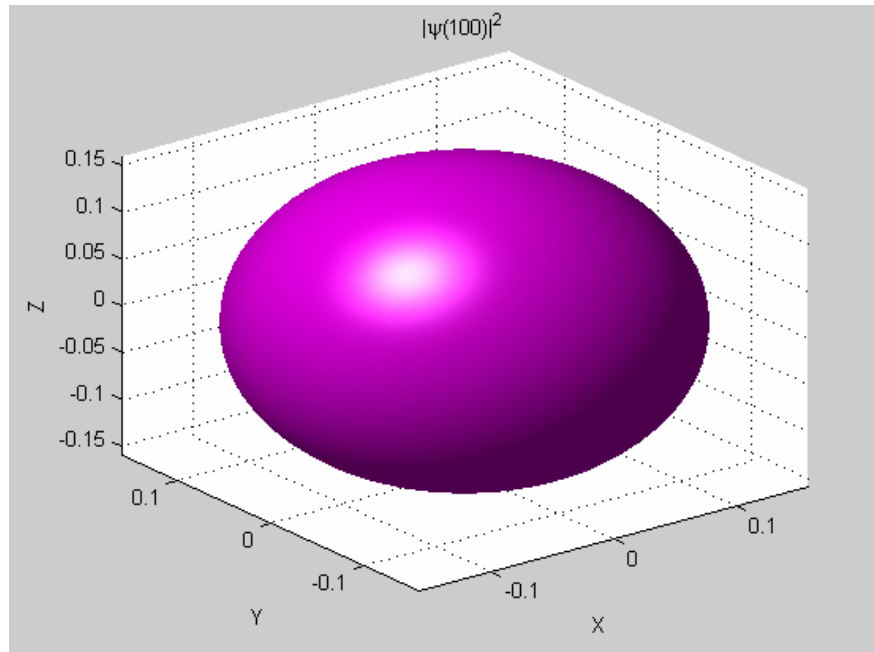
aimax = max([ximax yimax zimax]);
aimaxn= aimax*(-1.0);

figure(4);
surf(Xi,Yi,Zi,'FaceColor','m','EdgeColor','none')
xlabel('X');
ylabel('Y');
zlabel('Z');
camlight left; lighting phong
ttl3=['Imaginary \psi, n=',num2str(n),', l=',num2str(l),',
m=',num2str(m)];
title(ttl3);
axis([aimaxn aimax aimaxn aimax aimaxn aimax]);

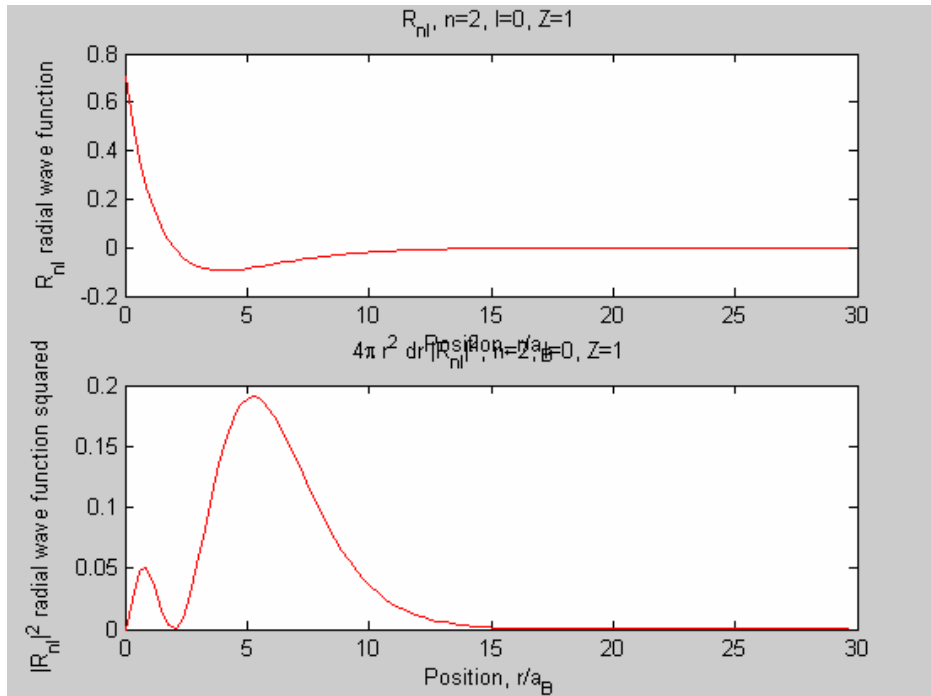
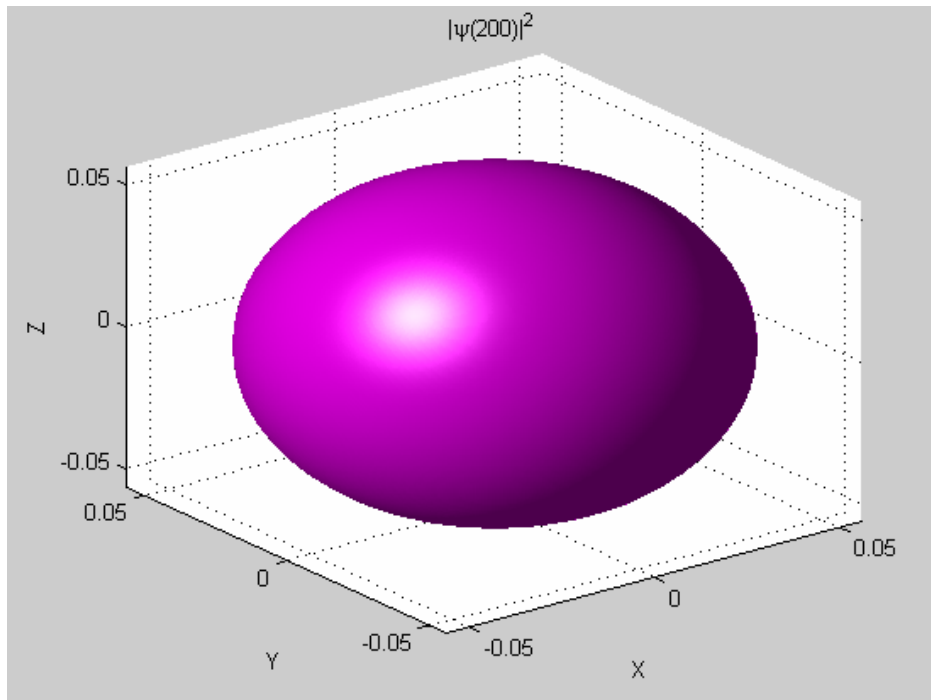
```

เอาร์ทพุทจากโปรแกรม คือ

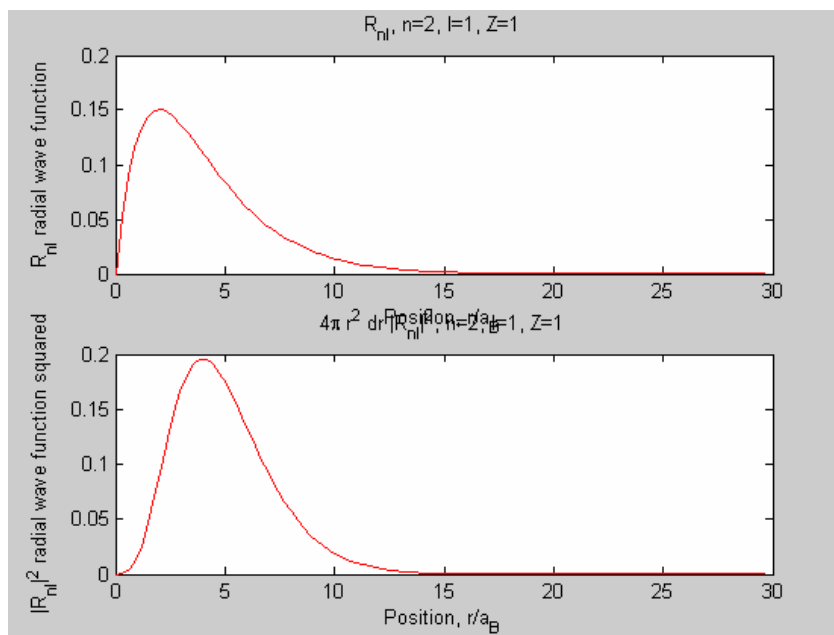
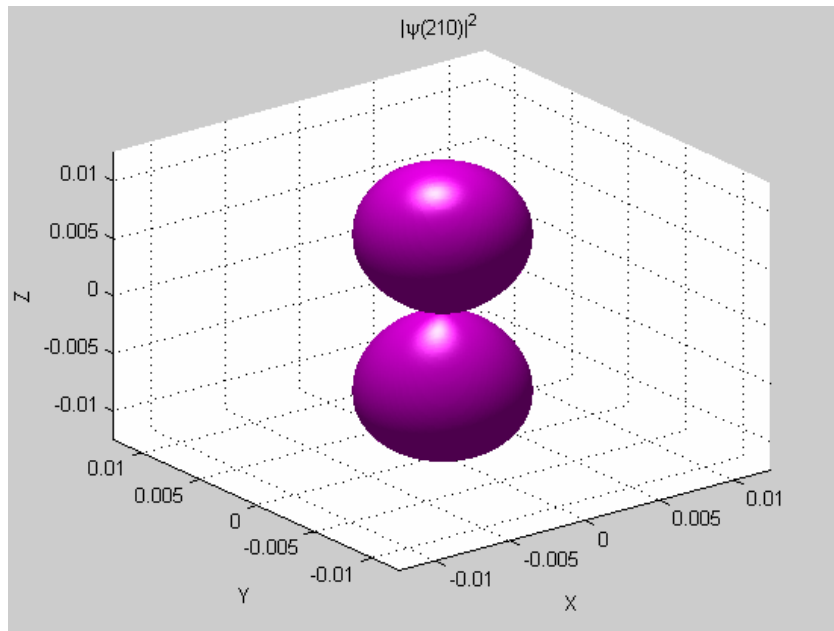
สำหรับ สเตทพื้น (1s)  $n=1, l=0, m_l=0$



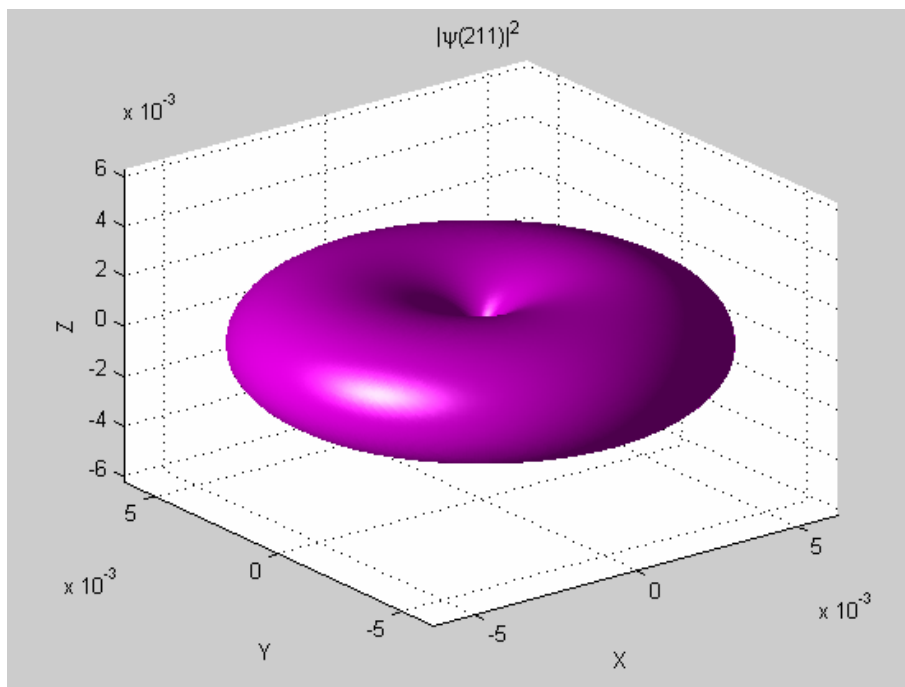
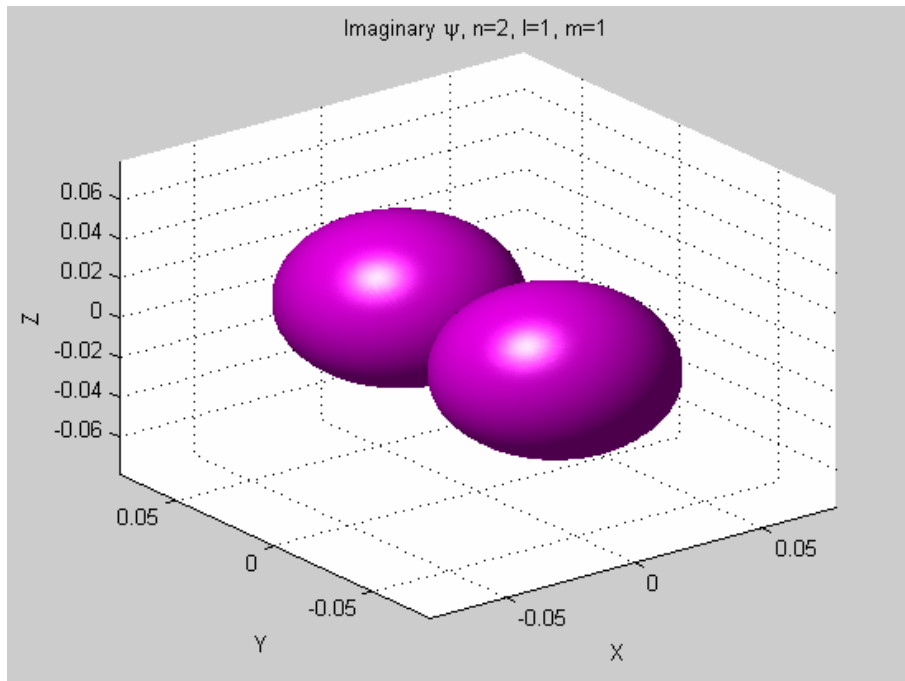
สำหรับ สเตทกระตุ้นที่ 1 (2s)  $n=2, l=0, m_l=0$

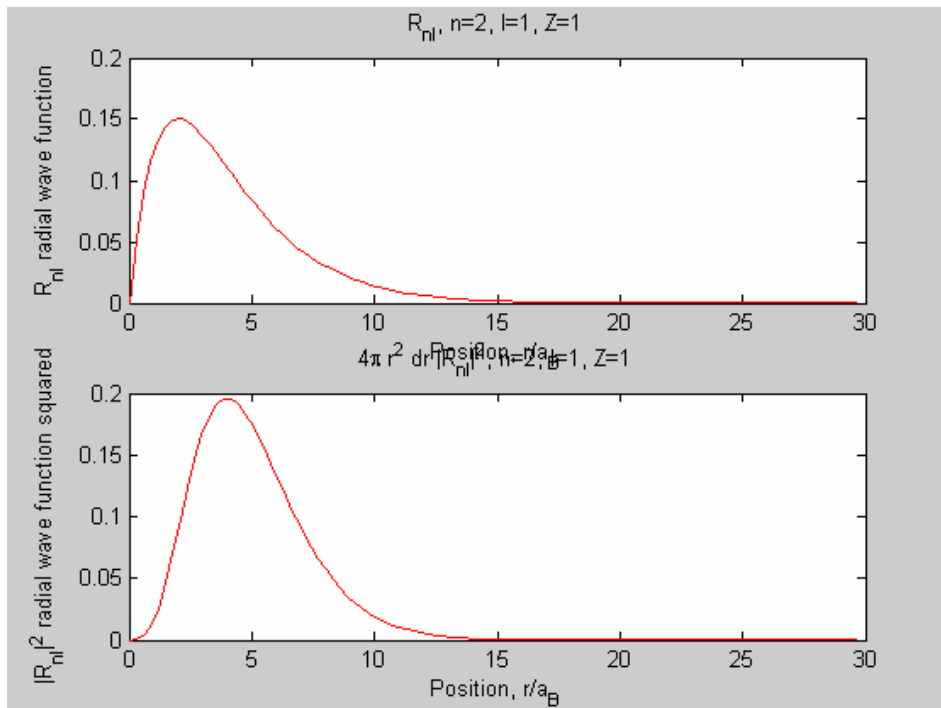


สำหรับ สเตทกระตุ้นที่ 2 (2p)  $n=2, l=1, m_l=0$



สำหรับ สเตทกระตุ้นที่ 3 (2p)  $n=2, l=1, m=1$





นักศึกษาสามารถเขียนกราฟสเตทอื่นๆได้ตามต้องการ



## แบบฝึกหัดบทที่ 10

- 1) จงหาค่าคงที่การนอร์แมลไลซ์ของฟังก์ชันคลื่นระดับพื้นของอะตอมไฮโดรเจน
- 2) จงคำนวณโอกาสที่จะพบอิเล็กตรอนภายในโปรตอนของอะตอมไฮโดรเจนที่อยู่ในสภาวะพื้น ( คำตอบ  $10^{-14}$  )
- 3) จงแสดงว่าตำแหน่งที่พบอิเล็กตรอนมากที่สุดจะอยู่ที่ใกล้  $r = a_0$  สำหรับอะตอมไฮโดรเจนที่อยู่ในสภาวะพื้น
- 4) จงคำนวณโอกาสที่จะพบอิเล็กตรอนอยู่ระหว่าง  $0.9a_0 < r < 1.1a_0$  สำหรับอะตอมไฮโดรเจนที่อยู่ในสภาวะพื้น
- 5) จงคำนวณระยะห่างเฉลี่ยระหว่างอิเล็กตรอนและโปรตอนที่อยู่ในสภาวะพื้นของอะตอมไฮโดรเจน
- 6) จงหาพลังงานของสเตท 2s และ 2p ของอะตอมไฮโดรเจน
- 7) จงหาพลังงานจลน์เฉลี่ยของอิเล็กตรอนในสภาวะพื้นของอะตอมไฮโดรเจน
- 8) จงหาโมเมนต์เชิงมุมรวม ( $J$ ) และองค์ประกอบในแนวแกน  $Z$  ( $J_z$ ) ของอิเล็กตรอนในสภาวะพื้นของอะตอมไฮโดรเจน
- 9) จงหาค่าที่เป็นไปได้ของโมเมนต์เชิงมุมรวม ( $J$ ) ของอิเล็กตรอนในสเตท p