

## Vetyatomin spektrin Balmerin sarja

Toisen kertaluvun differentiaaliyhtälöllä

$$y''(r) + \left(\frac{2}{r} + E\right) y(r) = 0 \quad (1)$$

voidaan kuvata vetyatomia. Yhtälö on ominaisarvoyhtälö, jota kvanttimekaniikassa kutsutaan Schrödingerin yhtälöksi. Sen ominaisarvona  $E$  saadaan elektronin energiat perustilassa sekä viritystiloissa. Ominaisfunktioista  $y(r)$  saadaan laskettua elektronin aaltofunktio  $\psi(r) = Cy(r)/r$ . Aaltofunktion neliö  $|\psi|^2$  kertoo todennäköisyyksiheyden, mikä puolestaan tarkoittaa sitä, että  $|\psi(r)|dV$  kertoo todennäköisyyden, jolla elektroni löytyy tilavuudesta  $dV$ . Vakio  $C$  on ns. normitusvakio ja se määrätään siten, että elektronin todennäköisyys löytyä koko avaruudesta on yksi, eli

$$4\pi \int_0^\infty |\psi(r)|^2 r^2 dr = 1. \quad (2)$$

Täten

$$C = 1 / \sqrt{4\pi \int_0^\infty |\psi(r)|^2 r^2 dr}. \quad (3)$$

Yksiköt näissä yhtälöissä on valittu siten, että energian yksikkö on Rydberg,  $Ry = 13.606$  eV, ja etäisyyden yksikkö on Bohrin radan säde  $a_0 = 0.52918$  Å.

Kokeellista tietoa vetyatomin rakenteesta saadaan mm. mittaamalla vetyatomin emissiospektrejä, eli vetyatomin lähettämien fotonien aallonpituutta. Fotoneja vetyatomi lähettää vain, jos sen elektroni siirtyy ylemmältä energiatasolta alemmalle, jolloin foton saa energiatasojen erotuksen verran energiaa. Kun fotonin energia tiedetään, niin sen aallonpituus  $\lambda = ch/E$  voidaan laskea. Vakio  $c$  on valon tyhjiönopeus  $c = 2.9979 \cdot 10^{-18}$  Å/s ja  $h$  on Planckin vakio  $h = 4.1357 \cdot 10^{-15}$  eVs. Näin ollen, yllä olevan Schrödingerin yhtälön kahden ominaisarvon,  $E_a$  ja  $E_b$ , erotuksen avulla lausuttuna

$$\lambda = \frac{911.2 \text{ Å}}{E_a - E_b}. \quad (4)$$

*Vetyatomin spektrin Balmerin sarjan viivat muodostuvat elektronin siirtyessä joltakin ylemmältä viritystilalta ensimmäiselle viritystilalle (eli toiselle energiatasolle). Kahden pisimmän aallonpituuden omaavan spektriviivan laskemiseksi ratkaise Schrödingerin yhtälön toiseksi alin ja kaksi seuraavaksi alinta ominaistilaa. Esitä tuloksina tilojen energiat ja aaltofunktiot normitettuina yhtälön (2) mukaisesti. Ilmoita lisäksi Balmerin sarjan kahden pisimmän aallonpituuden omaavan spektriviivan aallonpituudet.*

Vihje: Voit käyttää luennoissa olevaa iterointimenetelmää vetyatomin tilojen laskemiseksi. Tulosten tarkastamiseen voit käyttää analyttistä ratkaisua vetyatomin elektronin energioille:  $E_n = -1/(n+1)^2$ , missä  $n = 0, 1, 2, \dots$  ja yksikkönä on Rydberg.