একক 13 ❑ হাইড্রোজেন পরমাণু

গঠন ঃ

13.1 প্রস্তাবনা

কোয়ান্টাম বলবিদ্যার সাহায্যে পরমাণুর অধ্যয়ন করতে গেলে প্রথমেই একটি কেন্দ্রীয় ক্ষেত্রে (central field) ইলেকট্রনের গতির অধ্যয়ন প্রয়োজন। কিন্তু বিজ্ঞানীদের কাছে দীর্ঘদিন এটি একটি সমস্যা হয়েছিল। কারণ অনেক পরমাণুর মধ্যেই একাধিক ইলেকট্রনের উপস্থিতির জন্য একটি ইলেকট্রন অন্যান্য ইলেকট্রনদ্বারা প্রভাবিত হয়। ফলে যে বলের উদ্ভব হয় তা কুলম্বের সূত্র মেনে চলে না। কিন্তু হাইড্রোজেন পরমাণুর কেন্দ্রে একটি প্রোটন এবং বাইরের কক্ষে একটি মাত্র ইলেকট্রন স্থির বৈদ্যুৎ বলদ্বারা পরস্পরের সঙ্গে আবদ্ধ থাকে। (এখানে প্রোটনকে স্থির ধরা হয়) সুতরাং হাইড্রোজেন বা হাইড্রোজেন সদৃশ পরমাণুর পক্ষে ইলেকট্রনদ্বারা অনুভূত বলটি কুলম্ব বল এবং ক্ষেত্রটি কেন্দ্রীয় ক্ষেত্র) এই ইলেকট্রনের স্থিতিশক্তির রূপ

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r} \quad \text{যেখানে } Ze = \text{নিউক্লীয় আধান}$$

$$\varepsilon_0 = \text{মুক্ত স্থানের বিদ্যুৎশীলতা}$$

যেহেতু প্রোটন থেকে r দূরত্বে যে কোন বিন্দুতে স্থিতিশক্তির মান সমান সুতরাং প্রোটনের চারদিকে এটি গোলীয় প্রতিসাম্যে আছে। এক্ষেত্রে ইলেকট্রনের ধর্ম অধ্যয়ন করার জন্য শ্রোডিংগারের ত্রিমাত্রিক সময় নিরপেক্ষ সমীকরণ ব্যবহার করা হয়।

উদ্দেশ্য

- কিরূপে দুই কণার তরঙ্গ সমীকরণকে এক কণার তরঙ্গ সমীকরণে পরিণত করা যায়।

হাইড্রোজেন পরমাণুর ক্ষেত্রে শ্রোডিংগারের সমীকরণের সমাধান একবারে করা কঠিন। এই অংশে আপনারা সমীকরণটিকে θ সমীকরণ, ϕ সমীকরণ এবং অরীয় (r) সমীকরণ এই তিনটি অংশে ভাগ করে পৃথক পৃথকভাবে অপেক্ষকের রূপ নির্ণয় করতে পারবেন। এই অপেক্ষকগুলিকে মিলিয়ে হাইড্রোজেন পরমাণুর পূর্ণ তরঙ্গ অপেক্ষকের রূপ পাওয়া যায়।

- এছাড়া হাইড্রোজেন পরমাণুর শক্তিস্তরের রূপ নির্ণয় করতে পারবেন এবং আপজাত্য (degeneracy) কাকে বলে জানতে পারবেন। এক্ষেত্রে ইলেকট্রনের শক্তিস্তরগুলি পরীক্ষা প্রাপ্ত মানের সহিত সুন্দর ভাবে মিলে যায়।

- হাইড্রোজেনের অরীয় সমীকরণের সমাধান থেকে ইলেকট্রনের অরীয় বিন্যাসের সম্ভাব্যতা নির্ণয় করতে পারবেন।

13.2 হাইড্রোজেন পরমাণু ঃ দুই কণা তরঙ্গ সমীকরণ

এখনও পর্য্যন্ত আপনারা যে সকল শ্রোয়ডিংগার তরঙ্গ সমীকরণ সমাধান করেছেন সেগুলির সকলক্ষেত্রে একটি কণা কোন বলক্ষেত্রে অবস্থিত ছিল। কিন্তু হাইড্রোজেন পরমাণুর ক্ষেত্রে ধনাত্মক তড়িৎধর্মী কেন্দ্রক ও ঋণাত্মক আধানযুক্ত ইলেকট্রন পরস্পর কুলম্বের আকর্ষণ বলদ্বারা আবদ্ধ। এক্ষেত্রে দুটি কণার তরঙ্গ সমীকরণকে আপনার দুটি কণার অবস্থান স্থানাঙ্ক (x_1, y_1, z_1) ও (x_2, y_2, z_2)দ্বারা প্রকাশ করতে পারেন যেখানে প্রথমটি m_1 ভরের ইলেকট্রন ও দ্বিতীয়টি m_2 ভরের কেন্দ্রককে নির্দেশ করে। এই তরঙ্গ সমীকরণের রূপ,

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x_1, y_1 z_1, x_2, y_2, z_2, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m_1}\left(\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_1^2}\right) - \frac{\hbar^2}{2m_2}\left(\frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_2^2}\right) + V(x_1 y_1 z_1, x_2 y_2 z_2, t) \right]\psi \qquad \ldots\ldots 13.1$$

এখানে $V =$ বিভবশক্তি কণাদ্বয়ের আপেক্ষিক স্থান ভেক্টরের ওপর নির্ভরশীল, অর্থাৎ,

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

এখন ধরুন, $x = x_1 - x_2$, $y = y_1 - y_2$ এবং $z = z_1 - z_2$ আপেক্ষিক স্থানাঙ্ক ও $X = \frac{m_1 x_1 + m_2 x_2}{m_1 + m_2}$, $Y = \frac{m_1 y_1 + m_2 y_2}{m_1 + m_2}$ এবং $Z = \frac{m_1 z_1 + m_2 z_2}{m_1 + m_2}$ কণাদ্বয়ের ভরকেন্দ্রের স্থানাঙ্ক নির্দেশ করে। $m_1 + m_2 = M$ সংস্থার মোট ভর। ψ কে (x, y, z) ও (x, y, z) এবং t এরদ্বারা প্রকাশ করলে পাওয়া যায়

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=\left[-\frac{\hbar^2}{2M}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)+V(x,y,z)\right]\psi \quad \ldots (13.3)$$

যেখানে $\mu=\frac{m_1 n_2}{m_1+m_2}$; একে সমানীত ভর বলা হয়।

এখন $\psi(x, y, z, X, Y, Z, t) = u(x, y, z)\ U(X, Y, Z) f(t)$ ধরলে উপরোক্ত সমীকরণ হতে পাই

$$i\hbar\frac{df(t)}{f}=-\frac{\hbar^2}{2M}\frac{1}{U}\left[\frac{\partial^2}{\partial X^2}+\frac{\partial^2}{\partial Y^2}+\frac{\partial^2}{\partial Z}\right]U$$

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\cdot\frac{1}{u}\left[\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z}+V(x,y,z)\right]U \quad \ldots\ldots (13.4)$$

প্রতিটি পদ পরস্পর নিরপেক্ষ হওয়ায় আমরা লিখতে পারি

$$-\frac{\hbar^2}{2M}[\nabla^2 U]=F'U$$

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 u+Vu=Eu \quad \ldots\ldots (13.5)$$

এবং $i\hbar\frac{df}{f}=E+E'$

বা, $f\approx e^{-i(E+E')t/\hbar}$

13.5 এর প্রথম ও দ্বিতীয় সমীকরণের ∇^2 যথাক্রমে ভরকেন্দ্র স্থানাঙ্ক ও আপেক্ষিক স্থানাঙ্কের ল্যাপলাসিয়ান। প্রথম সমীকরণ ভরকেন্দ্রে অবস্থিত সংস্থার সমগ্র ভরবিশিষ্ট কণার মুক্ত গতিকে বোঝায় এবং এর শক্তির আইগেন মান নিরবচ্ছিন্ন হওয়ায় একে আলোচনায় নেওয়ার প্রয়োজন নেই। অপর পক্ষে দ্বিতীয় সমীকরণটি কুলম্ব বিভবের প্রভাবে μ = সমানীত ভর বিশিষ্ট কণার গতি এবং এর সমীকরণই এই আলোচনার মূলকেন্দ্র বিন্দু। তখন কেন্দ্রকের ভর $m_2 >> m_1$ (ইলেকট্রন ভর) বলে $\mu \simeq m_1$ অর্থাৎ বাস্তবে দ্বিতীয় সমীকরণটি কুলম্ব বিভবের প্রভাবে m_1 ভরের ইলেকট্রনে শ্রোডিংগার সমীকরণ।

13.3 হাইড্রোজেন পরমাণুর ইলেকট্রনের শ্রোডিংগারের ত্রিমাত্রিক তরঙ্গ সমীকরণ

আমরা জানি কার্টেজিয় তন্ত্রে শ্রোডিংগারের ত্রিমাত্রিক সমীকরণের রূপ

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V\right)u=Eu \quad \ldots\ldots (13.6)$$

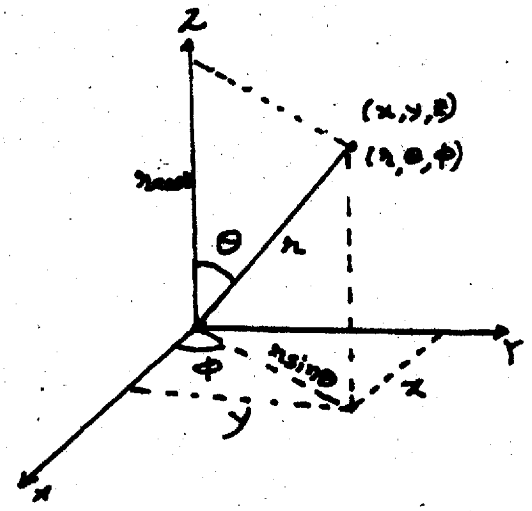
যেখানে u, x, y এবং z এর অপেক্ষক এবং $\nabla^2=\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}$

কিন্তু এক্ষেত্রে ইলেকট্রন কেন্দ্রীয় বলের প্রভাবে প্রভাবিত বলে কার্টেজিয় নির্দেশাঙ্কের পরিবর্তে গোলীয় পোলার নির্দেশাঙ্ক (r, θ, ϕ) (spherical polar co-ordinates) ব্যবহার করা প্রয়োজন, দুটি নির্দেশাঙ্কের মধ্যে সম্পর্ক (চিত্র 13.1 দেখুন)

$$x = r \sin\theta \cos\phi$$

$$y = r \sin\theta \sin\phi$$

এবং $$z = r\cos\theta$$



চিত্র 13.1

ইলেকট্রনের স্থিতিশক্তি প্রোটন থেকে r দূরত্বে সর্বত্র সমান (অর্থাৎ গোলীয় প্রতিসাম্যে আছে), সুতরাং V, r এর ওপর নির্ভরশীল এবং আমরা V-কে $V(r)$ লিখতে পারি।

গোলীয় পোলার তন্ত্রে ল্যাপ্লাসিয়ানের রূপ

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial r}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2\sin^2\phi}\left(\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right)$$

সুতরাং পরিবর্তিত নির্দেশতন্ত্রে শ্রোডিংগার সমীকরণের রূপ

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left[\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial r}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2\sin^2\phi}\left(\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right)\right]u + V(r)u = Eu \quad \ldots (13.7)$$

ওপরের সমীকরণের সমাধানের জন্য আমরা চররাশিগুলির পৃথকীকরণ পদ্ধতির (separation of voriables) সাহায্য নেব। প্রথমে সমীকরণটিকে অরীয় (radial) এবং (angular) কৌণিক অংশে ভাগ করার জন্য $u(r, \theta, \phi)$ কে লেখা হল $u(r, \theta, \phi) = R(r)\, y(\theta, \phi)$

এই মান (13,7) সমীকরণে বসিয়ে পাই

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left[\frac{Y}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right)+\frac{R}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial Y}{\partial\theta}\right)+\frac{R}{r^2\sin^2\phi}\left(\frac{\partial^2 Y}{\partial\phi^2}\right)\right]+V(r)u=Eu$$

ওপরের সমীকরণকে $u=RY$ দিয়ে ভাগ করলে

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu r^2}\left[\frac{1}{R^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right)+\frac{1}{Y\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial Y}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{Y\sin^2\phi}\frac{\partial^2 Y}{\partial\phi^2}\right]=E-V(\mathrm{r})$$

অথবা $$\frac{1}{R}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right)+\frac{2\mu r^2}{\hbar^2}[E-V(r)]=\frac{1}{Y}\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial Y}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2 Y}{\partial\phi^2}\right] \quad \ldots\ldots (13.8)$$

লক্ষ করুন (13.8) সমীকরণের বাম দিকের রাশিগুলি কেবলমাত্র এর ওপর নির্ভরশীল এবং ডানদিকের রাশিগুলি কেবলমাত্র θও ϕ এর ওপর নির্ভরশীল। এটি তখনই সম্ভব হয় যখন উভয় দিকের রাশিগুলি স্বতন্ত্রভাবে একটি স্থির রাশির (ধরা যাক λ) সমান হবে।

সুতরাং (13.8) সমীকরণের বামদিককে λ এর সমান লিখে আমরা কেবলমাত্র r এর ওপর নির্ভরশীল রাশিগুলির একটি সমীকরণ পাব। এই সমীকরণকে বলা হয় অরীয় সমীকরণ (radial equation)—

অর্থাৎ $$\frac{1}{R}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right)+\frac{2\mu r^2}{\hbar^2}[E-V(r)]=\lambda$$

$\frac{R}{r^2}$ দিয়ে গুণ করে পাই

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right)+\left[\frac{2u}{\hbar^2}E-V(r)-\frac{\lambda}{r^2}\right]R=0 \quad \ldots\ldots (13.9)$$

(13.9) সমীকরণটি অরীয় সমীকরণ

আবার (13.8) এর ডানদিকের রাশিগুলিকে λ এর সমান লিখলে যে সমীকরণটি পাওয়া যায় সেটি হল

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial Y}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2 Y}{\partial\phi^2}+\lambda Y=0 \quad \ldots\ldots (13.10)$$

লক্ষ করুন ওপরের সমীকরণের পদগুলি Y অর্থাৎ θ এবং ϕ উভয় চরের ওপর নির্ভরশীল। এই দুটি চররাশিকে আবার পৃথকীকরণের জন্য লেখা হল

$$Y(\theta,\phi)=\Theta(\theta)\,\Phi(\phi)$$

[এখানে বুঝতে পারছেন নিশ্চয়ই যে Θ, θ চরের অপেক্ষক এবং Φ কেবলমাত্র ϕ চরের অপেক্ষক]

ওপরের মান (13.10) সমীকরণে বসিয়ে

$$\frac{\Phi}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d\Theta}{d\theta}\right)+\frac{\Theta}{\sin^2\theta}\frac{d^2\Phi}{d\phi^2}+\lambda\Theta\Phi=0$$

ওপরের সমীকরণকে $\Theta\Phi$ দিয়ে ভাগ এবং $\sin^2$ দিয়ে গুণ করলে পাওয়া যায়

$$\frac{\sin\theta}{\Phi}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d\Theta}{d\theta}\right)+\frac{1}{\Phi}\frac{d^2\Phi}{d\phi^2}+\lambda\sin^2\Phi=0$$

অথবা
$$\frac{\sin\theta}{\Phi}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d\Theta}{d\theta}\right)+\lambda\sin^2\theta=-\frac{1}{\Phi}\frac{d^2\Phi}{d\phi^2} \qquad \dots\dots (13.11)$$

আগের ন্যায় ওপরের সমীকরণের বামদিকের রাশিগুলি কেবলমাত্র θ-র ওপর এবং ডানদিকের রাশি কেবলমাত্র ϕ এর ওপর নির্ভরশীল। অতএব প্রত্যেকদিকের রাশিগুলি স্বতন্ত্রভাবে একটি স্থির রাশি ν-এর সমান। ডানদিকের রাশিকে ν এর সমান লিখে একটি সমীকরণ পাওয়া যায় সেটিকে ϕ অথবা দিগংশীয় সমীকরণ বলা হয়।

ϕ সমীকরণ :

দিগংশীয় সমীকরণের রূপ

$$\frac{1}{\Phi}\frac{d^2\Phi}{d\phi^2}=\nu$$

বা,
$$\frac{d^2\Phi}{d\phi^2}+\nu\Phi=0 \qquad \dots\dots (13.12)$$

এই সমীকরণের সমাধান এর জন্য

$$\Phi(\phi)=Ae^{i|\nu|^{1/2}\phi}+Be^{i|\nu|^{1/2}\phi} \quad (\nu\neq 0 \text{ এর জন্য})$$

এবং
$$\Phi(\phi)=A+B\phi \dots (\nu=0 \text{ এর জন্য})$$

কিন্তু ϕ এর 0 থেকে 2π মানের মধ্যে সমাধানটি সদাচারী (well behaved) হওয়ার জন্য $\Phi(\phi)$ এবং $\frac{d\Phi}{d\phi}$ এর মান সন্তত এবং একমানী হওয়া প্রয়োজন। কাজেই ν এর মান কোন বর্গসংখ্যার (m^2) না নিলে প্রত্যেকটি ν এর জন্য আমরা $\Phi(\phi)$ এর দুটি মান পাব কেননা ν এর মান একটি ধনাত্মক এবং একটি ঋণাত্মক হবে যেটি m^2 এর বেলা হবে না। $\nu=0$ এর সমাধানে এই কারণে $B=0$

$\therefore$ (13.12) সমীকরণকে এখন আমরা লিখতে পারি

$$\frac{d^2\Phi}{d\phi^2}+m^2\Phi=0 \qquad \dots\dots (13.13)$$

এই সমীকরণের সমাধানের রূপ

$$\Phi(\phi)=Ae^{im\phi} \qquad \dots\dots (13.14)$$

A = ধ্রুবক রাশি এবং m কে বলা হয় চৌম্বক কোয়ান্টাম সংখ্যা (magnetic quantum number)। ϕ এর মানের 0 থেকে 2π রেডিয়ান পরিবর্তনের মধ্যে $\Phi(\phi)$ এর মান সসীম থাকে। এবং $\Phi(\phi)$ এর একমানী হওয়ার শর্ত নির্ণয়ের পক্ষে বলা যায় যে প্রত্যেক 2π রেডিয়ান কোণের পরে ϕ এর মান একই হয় অর্থাৎ দিগংশীয় কোন ϕ এবং $(\phi+2\pi)$ একই মধ্যতলকে (meridian plane) বুঝায়।

সুতরাং আমরা লিখতে পারি

$$\Phi(\phi) = \Phi(\phi + 2\pi) \qquad \ldots \ldots (13.15)$$

বা, $A e^{im\phi} = A e^{im(\phi + 2\pi)}$

বা, $A e^{im\phi} (1 - e^{2\pi i m}) = 0$

যেহেতু $Ae^{im\phi}$ শূন্য হতে পারে না

অতএব $1 - e^{2\pi i m} = 0$

বা, $e^{2\pi i m} = 1 \qquad \ldots \ldots (13.16)$

থেকে পাই $m = 0, \pm 1, \pm 2, + \ldots$

কাজেই দিগংশীয় তরঙ্গ অপেক্ষককে একমানী হতে হলে চুম্বকীয় কোয়ান্টাম সংখ্যার মান শূন্য অথবা ঋণাত্মক বা ধনাত্মক পূর্ণ সংখ্যা হবে।

এই দিগংশীয় তরঙ্গ অপেক্ষকের প্রমাণিকরণ নীচের উপায়ে করা যায়। তরঙ্গ অপেক্ষকের রূপ

$$\Phi(\phi) = Ae^{im\phi}$$

প্রমাণিকরণের শর্ত

$$\int_0^{2\pi} \Phi\Phi^* \, d\phi = 1$$

অথবা $\int_0^{2\pi} (Ae^{im\phi})(Ae^{im\phi})^* \, d\phi = 1$

বা, $\int_0^{2\pi} e^{im\phi} \, e^{-im\phi} \, d\phi = 1$

বা, $A^2 \int_0^{2\pi} d\phi = 1$ বা, $A^2.2\pi = 1$

$\therefore \quad A = \dfrac{2}{\sqrt{2\pi}}$

$\therefore$ প্রমাণিকৃত দিগংশীয় তরঙ্গ অপেক্ষকের রূপ

$$\Phi(\phi) = \frac{2}{\sqrt{2\pi}} e^{im\phi} \qquad \ldots \ldots (13.17)$$

Θ সমীকরণ ঃ

(13.11) সমীকরণের বামদিকের রাশিগুলিকে m^2 এর সমান লিখে আমরা Θ সমীকরণ পাই। Θ সমীকরণের রূপ

$$\frac{\sin\theta}{\Theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d\Theta}{d\theta}\right)+\lambda\sin^2\theta=m^2$$

বা, $$\frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d\Theta}{d\theta}\right)+\left(\lambda-\frac{m^2}{\sin^2\theta}\right)\Theta=0 \ldots \left[\frac{\Theta}{\sin^2\theta}\text{ দিয়ে গুণ করে }\right] \quad \ldots (13.18)$$

ওপরের সমীকরণের সমাধানের জন্য একটি স্বাধীন চর $\omega=\cos\theta$ নেওয়া হল $(-1<\omega<+1)$, একই সঙ্গে $\Theta(\theta)$ কে অপেক্ষক $P(\omega)$ দিয়ে পরিবর্তিত করা হল।

$$\Theta(\theta)=P(\omega)$$

যেহেতু $\sin^2\theta=(1-\omega^2)$

এবং $$\frac{d\Theta}{d\theta}=\frac{dP}{d\omega}\cdot\frac{d\omega}{d\theta}=-\frac{dP}{d\omega}\sin\theta$$

আমরা (13.18) সমীকরণকে পরিবর্তিত রূপে লিখতে পারি'

$$-\frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\times\frac{dP}{d\omega}\sin\theta\right)+\left(\lambda-\frac{m^2}{1-\omega^2}\right)P=0$$

বা, $$\frac{\sin\theta}{\sin\theta}\frac{d}{d\omega}\left(\sin^2\theta\frac{dP}{d\omega}\right)+\left(\lambda-\frac{m^2}{1-\omega^2}\right)P=0$$

(যেহেতু $\omega=\cos\theta,\ d\omega=-\sin\theta\, d\theta.\ \therefore\ \frac{1}{d\theta}=-\frac{\sin\theta}{d\omega}$)

বা, $$\frac{d}{d\omega}\left[(1-\omega^2)\frac{dP}{d\omega}\right]+\left(\lambda-\frac{m^2}{1-\omega^2}\right)P=0 \quad \ldots\ldots (13.19)$$

ওপরের তরঙ্গ সমীকরণের সমাধান নির্ণয়ের পদ্ধতি এবং সরল দোলকের তরঙ্গ সমীকরণের সমাধান নির্ণয়ের পদ্ধতি একই প্রকার।

(13.19) সমীকরণ সমাধানের জন্য মনে করি

$$P(\omega)=x^{\frac{|m|}{2}}y^{\frac{|m|}{2}}G(\omega)\text{ এখানে } x=(1-\omega)\text{ এবং } y=(1+\omega)$$

এবং $G(\omega)$, ω এর একটি বহুপদ (Polynomial)

$$\therefore \quad P(\omega)=(1-\omega^2)^{\frac{|m|}{2}}G(\omega)$$

এখানে m এর কেবলমাত্র ধনাত্মক মানগুলি নেওয়া হয়।

(13.19) সমীকরণে $P(\omega)$-র মান বসিয়ে আমরা $G(\omega)$-র সাপেক্ষে একটি অবকল সমীকরণ পাই। সমীকরণটির রূপ

$$\frac{d}{d\omega}\left[(1-\omega^2)\left\{-\frac{m}{2}(1-\omega^2)^{\frac{m}{2}-1}2\omega G+(1-\omega^2)^{\frac{m}{2}}G'\right\}\right]+\left(\lambda-\frac{m^2}{1-\omega^2}\right)(1-\omega^2)^{\frac{m}{2}}G=0$$

বা, $$\frac{d}{d\omega}\left[-m\omega(1-\omega^2)^{\frac{m}{2}}G+(1-\omega^2)^{\frac{m}{2}+1}G'\right]+\left(\lambda-\frac{m^2}{1-\omega^2}\right)(1-\omega^2)^{\frac{m}{2}}G=0$$

বা, $$-m(1-\omega^2)^{\frac{m}{2}}G+2\omega^2\frac{m^2}{2}(1-\omega^2)^{\frac{m}{2}-1}G-\omega m(1-\omega^2)^{\frac{m}{2}}G'-2\omega\left(\frac{m}{2}+1\right)(1-\omega^2)^{\frac{m}{2}}G'$$
$$+(1-\omega^2)^{\frac{m}{2}+1}G''+\left(\lambda-\frac{m^2}{1-\omega^2}\right)(1-\omega^2)^{\frac{m}{2}}G=0$$

ওপরের সমীকরণকে $(1-\omega^2)^{\frac{m}{2}}$ দিয়ে ভাগ করে

$$(1-\omega^2)G''-\left[2\omega\left(\frac{m}{2}+1\right)+\omega m\right]G'+\left[\lambda-\frac{m^2}{1-\omega^2}-m+\frac{\omega^2 m^2}{1-\omega^2}\right]G=0$$

বা, $$(1-\omega^2)G''-[2\omega(m+1)]G'+[\lambda-m(m+1)G]=0 \qquad \dots\dots (13.20)$$

সরলদোলকের ক্ষেত্রে বহুপদের (polynomial) সাহায্যে এই ধরনের সমীকরণের সমাধান আমরা করেছি। এক্ষেত্রে ও G কে একটি ঘাত শ্রেণীতে (Power series) প্রকাশ করা যায়

$$G=a_0+a_1\omega+a_2\omega^2+\dots$$

এই মান অনুসারে (13.20) সমীকরণের রূপ

[যেহেতু $G'=a_1+2a_2\omega+3a_3\omega^2+\dots$

$G''=2a_2+3.2a_3\omega+4.3a_4\omega^2\dots$]

$1.2a_2+2.3a_3\omega+3.4a_4\omega^2+4.5a_5\omega^3+\dots$

$-1.2a_2\omega^2-2.3a_3\omega^3-3.4a_4\omega^4+\dots$

$-2.1(m+1)a_1\omega-2.2(m+1)a_2\omega^2-2.3(m+1)a_3\omega^3+\dots$

$+\{\lambda-m(m+1)\}a_0+\{\lambda-m(m+1)\}a_1\omega+\{\lambda-m(m+1)\}a_2\omega^2+\dots=0$

ওপরের সমীকরণটি ω-এর সাপেক্ষে একটি অভেদ (identity)। কাজেই ω এর বিভিন্ন ঘাতের সহগগুলির মান আলাদাভাবে শূন্য হবে।

ω^0 এর সহগ $1.2a_2+\{\lambda-m(m+1)\}a_0=0$

ω^1 এর সহগ $2.3a_3+[\{\lambda-m(m+1)\}-2.1(m+1)]a_1=0$

ω^2 এর সহগ $3.4a_4+[\{\lambda-m(m+1)\}-2.2(m+1)-1.2]a_2=0$

ω^3 এর সহগ $4.5a_5+[\{\lambda-m(m+1)\}-2.3(m+1)-2.3]a_3=0$

অনুরূপে আমরা লিখতে পারি যে কোন সাধারণ রাশি ω^{ν} এর সহগ

$$(\nu + 1)(\nu + 2)a_{\nu+2} - [\{\lambda - m(m + 1)\} - 2.\nu(m + 1) - (\nu - 1)(\nu)]a_{\nu} = 0$$

বা, $$(\nu + 1)(\nu + 2)a_{\nu+2} = \{m^2 + m + \nu m + \nu^2 + \nu - \lambda]a_{\nu}$$

বা, $$(\nu + 1)(\nu + 2)a_{\nu+2} = [m(m + \nu + 1) + \nu(m + \nu + 1) - \lambda]a_{\nu} \qquad \ldots\ldots (13.21)$$

(13.21) সমীকরণ থেকে নীচের দুটি রাশির মধ্যের আবৃত্ত সম্পর্কে (recursion formula) উপনীত হওয়া যায়

$$\frac{a_{\nu+2}}{a_{\nu}} = \frac{(m + \nu)(m + \nu + 1) - \lambda}{(\nu + 1)(\nu + 2)} \qquad \ldots\ldots (13.22)$$

সীমাস্থ মান $\nu \to \alpha$ হলে ওপরের সম্পর্ককে লেখা যায়

$$\frac{a_{\nu+2}}{a_{\nu}} \to \frac{\nu.\nu}{\nu.\nu} \to 1$$ (যেহেতু ν^2 এর তুলনায় অন্যান্য রাশির মান নগন্য)

ওপরের সম্পর্কের অর্থ এই যে $|\omega| \to 1$ সীমাস্থ মানে শ্রেণীটি অপসারী। কিন্তু $|\omega| = 1$ মানেও শ্রেণীটির সসীম হওয়া প্রয়োজন এটি তখনই সম্ভব যখন কোনও একটি পদে শ্রেণীটি সমাপ্ত হবে। মনে করা যাক $\nu = k$ মানে শ্রেণীটি শেষ হয়, অর্থাৎ $a_{\nu}(= a_k)$ যুক্ত রাশিটি শ্রেণীর শেষ পদ এবং (13.22) সম্পর্কটি থেকে দেখা যায় যে, $a_{k+2}, \ldots a_{k+4}$ ......পদগুলির মান শূন্য হবে। অর্থাৎ $\nu = k$ এর জন্য (13.22) সম্পর্কের লবের রাশির মান শূন্য হবে,

$$(k + m)(k + m + 1) - \lambda = 0$$

বা, $$\lambda = (k + m)(k + m + 1) \qquad \ldots\ldots (13.23)$$

এখানে k এবং m উভয়ের মান 0, 1, 2, 3 ... হতে পারে।

সুতরাং আমরা লিখতে পারি $l = k + m$ ...... (13.24)

যেখানে $l = 0, 1, 2 \ldots$। l কে বলা হয় কক্ষীয় কোয়ান্টাম সংখ্যা (orbital quantum number)

অর্থাৎ $l = 0, |m|, |m| + 1 \ldots |m| + k$

অতএব $\lambda = l(l + 1)$ ...... (13.25)

আমরা দেখলাম যে θ সমীকরণের স্বীকৃত (allowed) সমাধানগুলি হল

$$\Theta(\theta) = (1 - \omega^2)^{\frac{|m|}{2}} G(\omega)$$

এখানে $G(\omega)$ শ্রেণীটি আবৃত্ত সম্পর্ক (13.22)দ্বারা পরিচালিত এবং আবৃত্ত সম্পর্কের λ রাশিটির মান $l(l + 1)$, Θ সমীকরণের সমাধান হিসাবে θ-র যে অপেক্ষকগুলি পাওয়া যায় গণিতের সাহায্য নিয়ে সেগুলিকে অত্যন্ত সুপরিচিত একটি বহুপদ বা পলিনোমিয়ালের সাহায্যে প্রকাশ করা যায়। এই পলিনোমিয়ালের নাম সংশ্লিষ্ট লেজেন্ড্রে(Associated Legendre) অপেক্ষক P_l^m।

লেজেন্ড্রে পলিনোমিয়াল $P_l(\cos\theta) = P_l(\omega)$ এর রূপ

$$p_l(\omega) = \frac{1}{2^l l!}\left(\frac{d}{d\omega}\right)^l (\omega^2 - 1)^l \qquad \ldots\ldots (13.26)$$

যেখানে $l = 0, 1, 2 \ldots$ এবং l মাত্রার এবং m ক্রমের সহায়ক লেজেন্ড্রে অপেক্ষক $p_l^m(\omega)$ এর রূপ

$$p_l^m(\omega) = \frac{1}{2^l l!}(1-\omega^2)^{\frac{m}{2}}\left(\frac{d}{d\omega}\right)^{l+m}(\omega^2-1)^l$$

$$= (1-\omega^2)^{\frac{m}{2}}\left(\frac{d}{d\omega}\right)^m P_l(\omega) \qquad \ldots\ldots (13.27)$$

যেখানে $m = 0, 1, 2 \ldots l$। মনে রাখা প্রয়োজন যে ওপরের সংজ্ঞা m এর ধনাত্মক মান এবং $m \le l$ এর জন্য প্রযোজ্য $m = 0$ এর জন্য $p_l^0(\omega) = p_l(\omega)$

$p_l(\omega)$ এবং $p_l^m(\omega)$ এর শ্রেণীকে জনক অপেক্ষক (Generating function) দ্বারা প্রকাশ করা যায়। সেগুলি হল

$$\sum_{l=0}^{\alpha} P_l(\omega) z^l = (1, 2Z\omega + Z^2)^{-\frac{1}{2}} \qquad \ldots\ldots (13.28)$$

এবং $$\sum_{l=m}^{\alpha} P_l^m(\omega) z^l = \frac{(2m)!(1-\omega^2)^{\frac{m}{2}} z^m}{2^m \cdot m!(1-2z\omega+Z^2)^{\frac{m+1}{2}}} \qquad \ldots\ldots (13.29)$$

$P_l(\omega)$ এবং $P_l^m(\omega)$ যে দুটি অবকল সমীকরণকে সন্তুষ্ট করে সেগুলি হল

$$(1-\omega^2)\frac{d^2P_l(\omega)}{d\omega^2} - 2\omega\frac{dP_l(\omega)}{d\omega} + l(l+1)P_l(\omega) = 0 \qquad \ldots\ldots (13.30)$$

এবং $$(1-\omega^2)\frac{d^2P_l^m(\omega)}{d\omega^2} - 2\omega\frac{dP_l^m(\omega)}{d\omega} + \left\{l(l+1) - \frac{m^2}{1-\omega^2}\right\}P_l^m(\omega) = 0 \qquad \ldots (13.31)$$

লক্ষ করুন $\Theta(\theta)$ অপেক্ষকের অবকল সমীকরণ (13.19) এবং $P_l^m(\omega)$ এর অবকল সমীকরণ (13.31) এর রূপ একই। কেবলমাত্র (13.31) সমীকরণে λ-র স্থানে $l(l+1)$ লেখা হয়েছে। (13.30) সমীকরণকে লেজেন্ড্রে সমীকরণ এবং (13.31) সমীকরণকে সংশ্লিষ্ট লেজেন্ড্রে সমীকরণ বলা হয়। θ সুতরাং সমীকরণের সমাধানকে সংশ্লিষ্ট লেজেন্ড্রে অপেক্ষক P_l^m এর সাহায্যে প্রকাশ করা যায়।

সমাধানগুলির মধ্যে যেগুলি নিম্নলিখিত সীমাস্থ শর্ত মেনে চলবে সেগুলিই গ্রহণীয় হবে। শর্তগুলি হল

(1) তরঙ্গ অপেক্ষক $\Theta(\theta)$ এর মান সর্বত্র সসীম হবে।

(2) l এর যে মানগুলি চৌম্বক কোয়ান্টাম সংখ্যার (m) পরম মান এর সমান বা তার থেকে বড় হবে, সেই মানগুলির জন্য তরঙ্গ অপেক্ষক বর্তমান থাকবে।

অর্থাৎ $l = |m|, |m|+1, |m|+2 \ldots$

বা, $l = 0$ অথবা ধনাত্মক সংখ্যা হবে।

l এর যে কোন মানের জন্য m এর মান হবে $m = 0, \pm 1, \pm 2 \ldots \pm l$

অতএব একটি বিশেষ কক্ষীয় কোয়ান্টাম সংখ্যা l এবং চৌম্বক কোয়ান্টাম সংখ্যা m বিশিষ্ট θ সমীকরণের প্রমাণিকৃত (normalised) সমাধানকে নিম্নলিখিত উপায়ে লেখা যায়

$$\Theta_l^m(\theta) = \sqrt{\frac{2l+1}{2} \cdot \frac{(l-m)!}{(l+m)!}}\ P_l^m(\cos\theta) \qquad \ldots\ldots (13.32)$$

আমরা পেয়েছি $Y_l^m(\theta, \phi) = \phi(\phi)\ \Theta_l^m(\theta)$

$\phi(\phi)$ এবং $\Theta_l^m(\theta)$ এর মান (13.17) এবং (13.32) সমীকরণ থেকে বসিয়ে আমরা পাই

$$Y_l^m(\theta, \phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\, e^{im\phi} \sqrt{\frac{2l+1}{2} \cdot \frac{(l-m)!}{(l+m)!}}\ P_l^m(\cos\theta)$$

$$= \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \cdot \frac{(l-m)!}{(l+m)!}}\ e^{im\phi} P_l^m(\cos\theta) \qquad \ldots\ldots (13.33)$$

$Y_l^m(\theta, \phi)$ অপেক্ষকগুলিকে গোলীয় হারমণিকে (spherical harmonics) বলা হয়।

l এবং m এর কয়েকটি বিভিন্ন মানের জন্য $Y_l^m(\theta, \phi)$ এর মানগুলি নীচে দেওয়া হল

$$Y_0^0 = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \qquad Y_1^0 = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos\theta$$

$$Y_1^{\pm 1} = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin\theta \exp(\pm i\phi)$$

$$Y_2^0 = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3\cos^2\theta - 1) \qquad Y_2^{\pm 1} = \mp \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin\theta\cos\theta \exp(\pm i\phi)$$

$$Y_2^{\pm} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2\theta \exp(\pm zi\phi)$$

পরীক্ষা করে দেখা যায় (13.33) সমীকরণের $Y_l^m(\theta, \phi)$ কক্ষীয়কৌণিক ভরবেগ সংকারকের বর্গ L^2 এবং এর z উপাংশ সংকারক L_z এর আইগেন অপেক্ষক যাদের আইগেনমান যথাক্রমে $l(l+i)\hbar^2$ এবং $m\hbar$. অরীয় তরঙ্গ সমীকরণ

(13.9) সমীকরণ থেকে L এর প্রদত্ত কোন মানের জন্য অরীয় সমীকরণের রূপ পাই

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2 \frac{dR_l}{dr}\right) + \frac{2m}{\hbar^2}[E - V(r)]\, R_l - \frac{\lambda}{r^2} R_l = 0$$

ওপরের সমীকরণে $\lambda = l(l+1)$ এবং $V(r) = \frac{-Ze^2}{r}$ লিখে আমরা পাই

$$\frac{d^2R_l}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{dR_l}{dr} + \frac{2m}{\hbar^2}\left[E + \frac{Ze^2}{r}\right]R_l - \frac{l(l+1)}{r^2}\,R_l = 0 \qquad \dots\dots (13.34)$$

মনে করি $R_l(r) = \frac{u_l(r)}{r}$

অবকল করে পাই

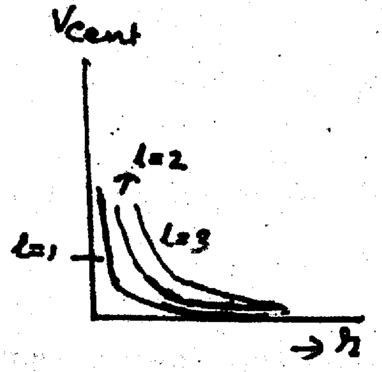
$$\frac{dR_l}{dr} = \frac{1}{r}\frac{du_l}{dr} - \frac{u_l}{r^2} \text{ এবং } \frac{d^2R_l}{dr} = \frac{1}{r}\frac{d^2u_l}{dr^2} - \frac{2}{r^2}\frac{du_l}{dr} + \frac{2u_l}{r^3}$$

সুতরাং $\frac{d^2R_l}{dr} + \frac{2}{r}\frac{dR_l}{dr} = \frac{1}{r}\frac{d^2u_l}{dr^2} - \frac{2}{r^2}\frac{du_l}{dr} + \frac{2u_l}{r^3} + \frac{2}{r^2}\frac{du_l}{dr} - \frac{2u_e}{r^3} = \frac{1}{r}\frac{d^2u_l}{dr^2}$

অতএব (13.34) সমীকরণে মান বসিয়ে লেখা যায়

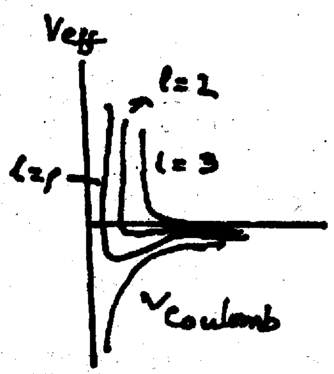
$$\frac{d^2u_l}{dr^2} + \frac{2m}{\hbar^2}\left[E + \frac{Ze^2}{r} - \frac{\hbar^2}{2m}\frac{l(l+1)}{r^2}\right]u_l = 0 \qquad \dots\dots (13.35)$$

ওপরের সমীকরণে $\left(-\frac{Ze^2}{r}\right)$ রাশিটি কুলম্ব বিভব Vcoul এবং $\frac{\hbar^2}{2m}\frac{l(l+1)}{r^2}$ রাশিটিকে বলা হয় অপকেন্দ্র বিভব (centrifugal polential) V_{cent}। দূরত্ব r এর সঙ্গে এই দুটি বিভবের পরিবর্তন (13.2) চিত্রে দেখানো হয়েছে।



চিত্র 13.2 (a)

l-এর বিভিন্ন মানের জন্য V_{cent}-এর r-এর সঙ্গে পরিবর্তন



চিত্র 13.2 (b)

দুটি বিভবের কার্যকরী পরিবর্তন (l-এর বিভিন্ন মানের জন্য)

অণুর মধ্যে ইলেকট্রনের বদ্ধ অবস্থাগুলির তরঙ্গ অপেক্ষক সম্বন্ধে জানতে আমরা আগ্রহী। সে সব ক্ষেত্রে $E < 0$ হবে।

মনে করি $E = -E'$ যেখানে $E' > 0$

এবং $K = \frac{2m}{\hbar^2}$

এখানে $\sqrt{KE'}$ এর মাত্রা দৈর্ঘ্যের অন্যোন্যক (reciprocal)। এই মান বসিয়ে (13.35) সমীকরণকে একটি মাত্রাহীন রূপে প্রকাশ করা যায়।

$$\frac{d^2u_l}{dr^2} + k\left[-E' + \frac{Ze^2}{r} - \frac{l(l+1)}{Kr^2}\right]u_l = 0 \qquad \dots\dots (13.36a)$$

মনে করি $P = 2r\sqrt{KE'}$ ...... (13.36b)

অথবা $\frac{1}{r} = \frac{2}{P}\sqrt{KE'}$

এখানে P একটি মাত্রাহীন সংখ্যা

এখন $\frac{d}{dr} = \frac{dp}{dr}\cdot\frac{d}{dp} = 2\sqrt{KE'}\cdot\frac{d}{dp}$

$\therefore \quad \frac{d^2}{dr^2} = 4kE'\cdot\frac{d^2}{dP^2}$

সমীকরণ (13.36a) এ ওপরের মান বসিয়ে

$$4kE'\frac{d^2u_l}{dp^2} + k\left\{-E' + \frac{2Ze^2}{P}\sqrt{kE'} - \frac{l(l+1)}{k}\frac{4kE'}{P^2}\right\}u_l = 0$$

বা, $$\frac{d^2u_l}{dp^2} + \left\{-\frac{1}{4} + \frac{Ze^2}{2P}\sqrt{\frac{k}{E'}} - \frac{l(l+1)}{p^2}\right\}u_l = 0 \qquad \dots\dots (13.37a)$$

$\frac{Ze^2}{2}\sqrt{\frac{k}{E'}} = n$ (মাত্রাহীন রাশি) বসিয়ে পাই

$$u_l'' + \left\{-\frac{1}{4} + \frac{n}{P} - \frac{l(l+1)}{P^2}\right\}u_l = 0 \left(\text{ এখানে } u_l'' = \frac{d^2u_l}{dP^2}\right) \qquad \dots\dots (13.38)$$

(13.38) সমীকরণ, (13.35) সমীকরণের মাত্রাহীন রূপ

$P \to \alpha$ হলে (13.38) সমীকরণের রূপ হয়

$u_l'' - u_l/4 = 0$

ওপরের সমীকরণের সমাধান $u_l \sim \exp\left(-\frac{P}{2}\right)$

$P \to 0$ হলে (13.38) সমীকরণের রূপ হবে

$$u_l'' - \frac{l(l+1)}{P^2}u_l = 0$$

এটির সমাধানের রূপ $u_l \sim P^{l+1}$

[P এর বৃহৎ মানের জন্য অন্য একটি সম্ভাব্য সমাধান $u_l \sim \exp\left(\frac{P}{2}\right)$ কিন্তু $P \to \infty$ সীমায় এটির মান অসীম হয়। কাজেই এই সমাধান গ্রহণযোগ্য নয়। অনুরূপভাবে P এর ক্ষুদ্রমানের জন্য আর একটি সমাধান $u_l \sim P^{-1}$, কিন্তু $P \to 0$ সীমায় এটির মানও অসীম হওয়ায় এই মানটি গ্রহণযোগ্য নয়।]

সুতরাং সাধারণভাবে P এর যে কোন মানের জন্য নীচের সমাধানটি চেষ্টা করা যায়।

$$u_l(P) = \exp\left(-\frac{P}{2}\right)P^{l+1}V(P) \qquad \dots\dots (13.39)$$

সমীকরণ (13.39) কে অবকল করে পাই

$$u_l' = \exp\left(-\frac{P}{2}\right)\left\{P^{l+1}V^1 + (l+1)P^l V - \frac{1}{2}P^{l+1}V\right\}$$

$$u_l'' = \exp\left(-\frac{P}{2}\right)\left\{P^{l+1}V'' + 2(P+1)P^l V' + l(l+1)P^{l-1}V - \frac{1}{2}P^{l+1}V' - \frac{l+1}{2}P^l V\right.$$
$$\left. - \frac{1}{2}P^{l+1}V' - \frac{l+1}{2}P^l V' + \frac{1}{4}P^{l+1}V\right\}$$

$$= ex\left(-\frac{P}{2}\right)P^{l+1}\left\{V'' + \frac{2(l+1)}{P}V' - V' - \frac{l+1}{P}V + \frac{l(l+1)}{P^2}V + \frac{V}{4}\right\}$$

ওপরের u_l' এবং u_l'' এর মান (13.38) সমীকরণে বসিয়ে পাই

$$\exp\left(-\frac{P}{2}\right)P^{l+1}\left\{V'' + \frac{2(l+1)}{P}V' - V' - \frac{l+1}{P}V + \frac{l(l+1)}{P^2}V + \frac{V}{4} - \frac{V}{4}\right.$$
$$\left. + \frac{n}{p}V - \frac{l(l+1)}{P^2}V\right\} = 0$$

$$\therefore \quad PV'' + (2l + 2 - P)V' + \{n - (l+1)\}V = 0$$

বা, $$PV'' + \{(2l+1) + (1-P)\}\ V + \{(n+l) - (2l+1)\}V = 0 \qquad \dots\dots (13.40)$$

(13.40) সমীকরণ এবং সংযুক্ত লাগেরে বহুপদের (associated Laguerre polynomial) সমীকরণের চেহারা একই প্রকার অতএব আমাদের লাগেরে বহুপদের আলোচনা করা একটু প্রয়োজন

লাগেরে বহুপদ $Ln(P)$ (n = একটি সংখ্যা)

এর রূপ $$Ln(P) = \exp(P)\left[\frac{d}{dP}\right]^n \{\exp(-P)P^n\} \qquad \dots\dots (13.40a)$$

$$= (-1)^n \left\{P^n - \frac{n^2}{1!}P^{n-1} + \frac{n^2(n-1)^2}{2!}P^{n-2} + \dots + (-1)^n n!\right\}$$

এবং $(n-k)$ মাত্রার সংশ্লিষ্ট লাগেরে বহুপদের রূপ

$$L_n^k(P) = \left[\frac{d}{dP}\right]^k L_n(P) = \left[\frac{d}{dP}\right]^k \left\{\exp(P)\left(\frac{d}{dP}\right)^n (\exp(-P)P^n)\right\} \quad \ldots\ldots (13.40b)$$

$Ln(P)$ এবং $L_n^k(P)$ কে জনক অপেক্ষক দ্বারা প্রকাশ করা যায় সেগুলি হল

$$\sum_{n=0}^{\alpha} \frac{L_n(P)}{n!} Z^n = \frac{\exp\left\{-\dfrac{pz}{(1-z)}\right\}}{(1-z)}, |Z| < 1 \quad \ldots\ldots (13.41a)$$

$$\sum_{n=k}^{\alpha} \frac{L_n^k(P)}{n!} Z^n = \frac{(-z)^k \exp\left\{-\dfrac{pz}{1-z}\right\}}{(1-z)^{k+1}} \quad \ldots\ldots (13.41b)$$

$L_n(P)$ এবং $L_n^k(P)$ যে দুটি অবকল সমীকরণকে সন্তুষ্ট করে সেগুলি হল

$$P\frac{d^2L_n(P)}{dp^2} + (1-p)\frac{dL_n(P)}{dp} + nL_n(P) = 0 \quad \ldots\ldots (13.42a)$$

$$P\frac{d^2L_n^k(P)}{dp^2} + (K+1-P)\frac{dL_n^k(P)}{dp} + (n-k)L_n^k(P) = 0 \quad \ldots\ldots (13.42b)$$

(13.40) সমীকরণ এবং ওপরের সমীকরণের তুলনা করলে দেখা যায় যে দুটি সমীকরণ একই প্রকার, শুধু (13.40) এ K এর স্থানে $(2l+1)$ এবং n এর জায়গায় $(n+l)$ বসানো হয়েছে। সুতরাং $V(P)$ অপেক্ষকটিকে আমরা সংশ্লিষ্ট লাগেরে বহুপদের সাপেক্ষে প্রকাশ করতে পারি

$$V(P) = L_{n+1}^{2l+1}(P) = \left(\frac{d}{dP}\right)^{2l+1} L_{n+1}(P) \quad \ldots\ldots (13.43)$$

$V(P)$ কে একটি ঘাত শ্রেণীতে প্রকাশ করলে

$$(P) = P^\tau \sum_i a_i P^i \quad \ldots\ldots (13.44)$$

যেখানে $i = 0, 1, 2 \ldots$ এবং τ এর মান নির্ণয় করতে হবে। আমরা লিখতে পারি $V'(P) = P^\tau\Sigma(i+\tau)a_iP^{i-1}$

এবং $V''(P) = P^\tau\Sigma(i+\tau)(i+\tau-1)a_iP^{i-2}$

ওপরের মান দুটি 13.40 নং সমীকরণে বসিয়ে পাই

$$\Sigma(i+\tau)(i+\tau-1)a_iP^{i+\tau-1} + \Sigma(2l+1+1-P)(i+\tau)a_iP^{i+\tau-1} + \Sigma\{(n+l)-(2l+1)\}\, a_iP^{i+\tau} = 0$$

বা,
$$\Sigma\{(i+\tau)(i+\tau-1) + 2(l+1)(i+\tau)\}\, a_iP^{i+\tau-1} + \Sigma\{(n-l-1)-(i+\tau)\}a_i\, P^{i+\tau} = 0 \quad \ldots\ldots (13.45)$$

(13.45) নং সমীকরণ P এর সব মানের জন্য সিদ্ধ হবে। সুতরাং P এর প্রত্যেক ঘাতের সহগগুলিকে পৃথকভাবে শূন্য হতে হবে। $i = 0$ এর জন্য P এর সর্বনিম্ন ঘাত $(\tau - 1)$

$P^{\tau-1}$ এর সহগ $= \{\tau(\tau - 1) + 2\tau(l + 1)\}a_0$, এটির মান শূন্য হবে।

অর্থাৎ $\tau(\tau + 2l + 1)a_0 = 0$ ...... (13.46)

সুতরাং (13.44)-র শ্রেণীর P^τ রাশির τ এর প্রারম্ভিক মান হয় শূন্য না হয় $\tau = -(2l + 1)$। কিন্তু τ এর দ্বিতীয় মানটি গ্রাহ্য নয় কেননা P এর এই মান হলে $P \to 0$ সীমায় $V(P) \to \alpha$ অর্থাৎ অসীম হয়ে যাবে। সুতরাং আমাদের $\tau = 0$ মানটি গ্রহণ করতে হবে।

$P^{i+\tau}$ এর সহগ

$$\{(i + \tau)(i + \tau + 1) + 2(i + \tau + 1)(l + 1)\}a_{i+1} + \{(n - l - 1) - (i + \tau)\}a_i = 0$$

... ... (13.47)

(13.47) নং সমীকরণ থেকে পাই

$$\frac{a_{i+1}}{a_i} = \frac{(i + \tau + l + 1) - n}{(i + \tau + 1)(i + \tau + 2l + 2)} \qquad \text{... ... (13.48)}$$

i এর মান যখন খুব বড় হয় তখন (13.48) সমীকরণকে লেখা যায়

$$\frac{a_{i+1}}{a_i} \sim \frac{i}{i^2} \approx \frac{1}{i}$$

আমরা জানি যে e^P শ্রেণীটির বিস্তারের রূপ

$$e^P = 1 + P + \frac{P^2}{\underline{|2}} + \dots \frac{P^i}{\underline{|i}} + \frac{P^{i+1}}{\underline{|i+1}} + \dots$$

$$\text{এক্ষেত্রে } \frac{P^{i+1}\text{পদের সহগ}}{P^i\text{ পদের সহগ}} = \frac{P^i}{\underline{|i+1}} = \frac{i}{i+1} \approx \frac{1}{i}$$

সুতরাং (13.39) সমীকরণ দেখলে বোঝা যাচ্ছে অরীয় সমাধানটি P এর বৃহৎ মানের জন্য $\exp\left(\frac{P}{2}\right)$ এর ন্যায় আচরণ করবে। কিন্তু e^P শ্রেণীটি অপসারী সুতরাং (13.39) শ্রেণীটিও অপসারী হবে। অতএব দেখা যাচ্ছে যে P এর সাধারণ সমাধান (13.34)টিকে সদাচারী হতে গেলে $V(P)$ এর শ্রেণীটিকে কোনও পদে গিয়ে সমাপ্ত হতে হবে। মনে করি $V(P)$ এর শ্রেণীটি $\tau = 0$ অবস্থায় S-তম রাশিতে সমাপ্ত হয়। সেক্ষেত্রে a_{s+1} এবং উচ্চতর পদগুলির সহগগুলির মান শূন্য হবে। এবং এর জন্য প্রয়োজনীয় শর্ত হল

$$(n - l - 1) - (S + \tau) = 0$$

বা, $$(S + \tau + l + 1) - n = 0$$

এখানে যেহেতু $\tau = 0$ অতএব ওপরের সম্পর্ককে আমরা লিখতে পারি

$$(S + l + 1) - n = 0$$

বা, $$n = s + l + 1$$

S এবং l উভয়েরই মান 0, 1, 2 ... ইত্যাদি হতে পারে সুতরাং বোঝা যাচ্ছে nও একটি পূর্ণ সংখ্যা হবে। n কে বলা হয় মুখ্য কোয়ান্টাম সংখ্যা (Principal quantum number) এটির সম্ভাব্য মানগুলি হল

$$n = 1, 2, 3, 4 \ldots \qquad \ldots \ldots (13.50)$$

l এর যে কোন একটি মানের জন্য, n এর সম্ভাব্য মান $(l + 1)$, $(l + 2)$, $(l + 3)$ ...। অপর পক্ষে n এর যে কোন একটি মানের জন্য l এর সম্ভাব্য মানগুলি হল $= 0, 1, 2 \ldots (n - 1)$।

13.38 সমীকরণের মাত্রাহীন রূপের জন্য যে n রাশি বসানো হয়েছে অর্থাৎ $n = \frac{Ze^2}{2}\sqrt{\frac{K}{E}}$। এ থেকে শক্তির বিভিন্ন আইগেন মান পাওয়া যায় কারণ $n = 1, 2, 3, \ldots$ ইত্যাদি।

$$n^2 = \frac{Z^2e^4}{4} \cdot \frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{(-E)}$$

বা, $$E_n = -\frac{mz^2e^4}{2n^2\hbar^2} \qquad \ldots \ldots (13.51)$$

ক্ষার অণুগুলির (alkali atoms) গঠনে দৃঢ়ভাবে বদ্ধ কতকগুলির ইলেকট্রনের বাইরের কক্ষে একটিমাত্র ইলেকট্রন থাকে। এই ইলেকট্রনটিকে সহজেই সরানো যায়। উদাহরণ স্বরূপ লিথিয়ামের ক্ষেত্রে ভিতরের ক্রোড় কক্ষে দুটি ইলেকট্রন এবং বহিঃস্থ কক্ষে একটি যোজ্যতা ইলেকট্রন (valence electron) আছে। এই যোজ্যতা ইলেকট্রনের কক্ষপথ যদি ক্রোড় অঞ্চলের (core region) বাইরে থাকে তাহলে ক্রোড় অঞ্চলের ইলেকট্রন দুটি কার্যকরীভাবে কেন্দ্রের ধনাত্মক নিউক্লীয় চার্জ $+ 3e$ কে আড়াল করে রাখে। ফলে বাইরের যোজ্যতা ইলেকট্রন কর্তৃক অনুভূত বিভবের মান $Z = 1$ নিউক্লিয়াস দ্বারা সৃষ্ট বিভবের সমান হবে অর্থাৎ কার্যতঃ এই পরমাণুটি হাইড্রোজেন পরমাণুর ন্যায় আচরণ করবে ফলে হাইড্রোজেন পরমাণুর জন্য শক্তিস্তরের যে মানগুলি আমরা নির্ণয় করেছি এই ক্ষেত্রের শক্তিস্তরের মানও একইপ্রকার হবে। অপরদিকে যোজ্যতা ইলেকট্রনের উপবৃত্তাকার কক্ষপথ যদি ক্রোড় অঞ্চল ভেদ করে, তাহলে ক্রোড় ইলেকট্রনগুলি নিউক্লীয় ধনাত্মক আধানকে সম্পূর্ণ আবরিত করতে পারে না।

সেক্ষেত্রে শক্তিস্তর গুলির রূপ এবং হাইড্রোজেন পরমাণুর শক্তিস্তরের রূপের মধ্যে অনেক পার্থক্য হয়। বহিঃস্থ কক্ষের যোজ্যতা ইলেকট্রনের (valence electron) ক্রোড় অঞ্চলের ভেদ্যতার পরিমাণ l কোয়ান্টাম সংখ্যাটির ওপর নির্ভর করে

হাইড্রোজেন ও অনুরূপ পরমাণুর তরঙ্গ অপেক্ষক

প্রমাণিকৃত (normalised) অরীয় অপেক্ষকের রূপ

$$R_{nl}(r) = 2\left(\frac{z}{na_0}\right)^{\frac{3}{2}} \sqrt{\frac{(n-l-1)!}{n[(n+l)!]^3}} \left(\frac{2zr}{na_0}\right)^l e^{\frac{-zr}{na_0}} L_{n+1}^{2l+1}\left(\frac{2zr}{na_0}\right) \qquad \ldots \ldots (13.52)$$

যেখানে $a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2} = 0.529A°$ (হাইড্রোজেন পরমাণুর বোর কক্ষপথের মান)

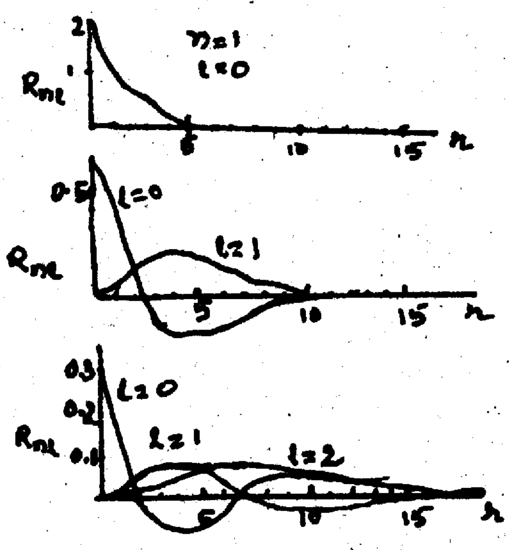
n = মুখ্য কোয়ান্টাম সংখ্যা

L = কক্ষীয় কোয়ান্টাম সংখ্যা

আমরা জানি যে লাগেরে বহুপদ $L_{n+1}(P)$ (13.36a সমীকরণ দ্রষ্টব্য) এর সংশ্লিষ্ট লাগেরে বহুপদ হল $L_{n+1}^{2l+1}(P)$ (13.36b সমীকরণ দ্রষ্টব্য)।

(13.36b) সমীকরণ থেকে আমরা পাই

$$P = 2r\sqrt{kE'} = 2r\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}\cdot\frac{mz^2}{2n^2}\frac{e^4}{\hbar^2}} = \frac{2mZe^2r}{n\hbar^2} = \frac{2Z}{na_0}r$$



চিত্র 13.3

R_{nl} এর সঙ্গে r (a_0/z এককে অঙ্কিত) এর পরিবর্তন (বিভিন্ন n এবং l এর জন্য) R_{nl}, $\left(\frac{a_0}{z}\right)^{3/2}$ এককে অঙ্কিত।

হাইড্রোজেন সদৃশ পরমাণুর কয়েকটি প্রমাণিকৃত তরঙ্গ অপেক্ষকের রূপ (চিত্র 13.3 দ্রষ্টব্য)

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

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

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

$$R_{30} = \left(\frac{Z}{3a_0}\right)^{\frac{3}{2}} 2\left[1 - \frac{2}{3}\frac{Zr}{a_0} + \frac{2}{27}\left(\frac{Zr}{a_0}\right)^2\right] \exp\left(-\frac{Zr}{3a_0}\right)$$

$$R_{31} = \left(\frac{Z}{3a_0}\right)^{\frac{3}{2}} \frac{4\sqrt{2}Zr}{9a_0}\left(1 - \frac{1}{6}\frac{Zr}{a_0}\right) \exp\left(-\frac{Zr}{3a_0}\right)$$

$$R_{32} = \left(\frac{Z}{3a_0}\right)^{\frac{3}{2}} \frac{2\sqrt{2}}{27\sqrt{5}}\left(\frac{Zr}{a_0}\right)^2 \exp\left(-\frac{Zr}{3a_0}\right) \qquad \dots \dots (13.53)$$

অতএব প্রমাণিকৃত তরঙ্গ অপেক্ষকের সময় নিরপেক্ষ সম্পূর্ণরূপ

$$\Psi nlm(r, \theta, \phi) = R_{n_l}(r)\, Y_l^m(\theta, \phi) \qquad \dots \dots (13.54)$$

নীচে হাইড্রোজেন সদৃশ কয়েকটি সম্পূর্ণ তরঙ্গ অপেক্ষকের (total wave function) রূপ

$$\psi_{100} = \frac{1}{\sqrt{\pi}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} \exp(-\sigma)$$

$$\psi_{200} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} (2-\sigma)\exp\left(-\frac{\sigma}{2}\right)$$

$$\psi_{210} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} \sigma\exp\left(-\frac{\sigma}{2}\right)\cos\theta$$

$$\psi_{300} = \frac{1}{81\sqrt{3\pi}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} (27 - 18\sigma + 2\sigma^2)\exp - \frac{\sigma}{3}$$

এখানে $\sigma = \frac{Zr}{a_0}$

হাইড্রোজেন পরমাণুর স্বাভাবিক অবস্থায় (অর্থাৎ $Z = 1, n = 1, l = 0, m = 0$) তরঙ্গ অপেক্ষকের রূপ

$$\psi_{100} = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-\frac{r}{a_0}}$$

সেক্ষেত্রে নিউক্লিয়াসের সাপেক্ষে ইলেকট্রনের সম্ভাব্যতা বিস্তার (Probability distribution) অপেক্ষকের রূপ

$$\psi_{100}^{*}\psi_{100} = \frac{1}{\pi a_0^3} e^{-\frac{2r}{a_0}}$$

এবং নিউক্লিয়াস থেকে r এবং $r + dr$ দূরত্বের মধ্যে ইলেকট্রনের থাকার সম্ভাব্যতা।

$$P(r)dr = \int \psi_{100}^{*}\psi_{100}\,\vec{dr} = \frac{1}{\pi a_0^3} e^{-\frac{2r}{a_0}} r^2 dr \int_0^{\pi} \sin\theta\, d\theta \int_0^{2\pi} d\phi$$

$$= \frac{4}{a_0^3} e^{-\frac{2r}{a_0}} r^2 dr \qquad \ldots\ldots (13.55)$$

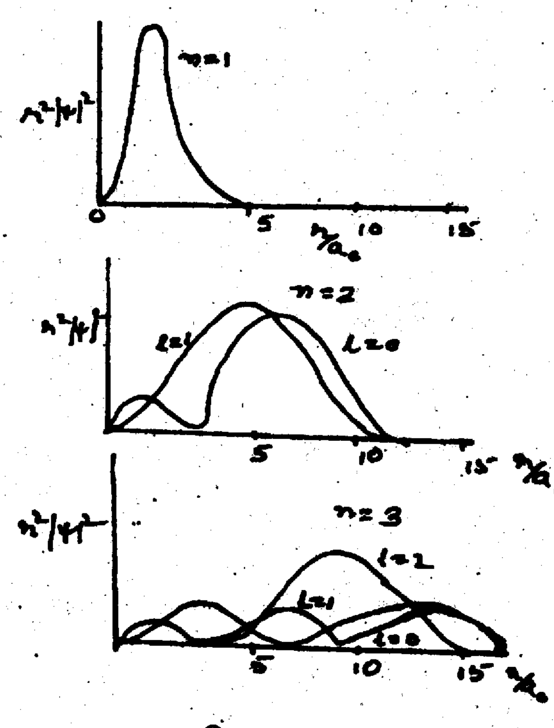
নিউক্লিয়াস থেকে ইলেকট্রনের সর্বাপেক্ষা সম্ভাব্য দূরত্ব নিম্নের উপায়ের সাহায্যে নির্ণয় করা যায়

আমরা জানি যে r এর সর্বাপেক্ষা সম্ভাব্য অবস্থানে $P(r)$ এর মান সর্বাধিক হওয়া উচিত।

অর্থাৎ $\frac{d}{dr}P(r) = 0$

অথবা $\frac{d}{dr}\left(\frac{4}{a_0^3} e^{-\frac{2r}{a_0}} . r^2\right) = 0$

যেখান থেকে পাওয়া যায় $r = a_0 =$ বোর ব্যাসার্ধের মান সুতরাং হাইড্রোজেন অণুর স্বাভাবিক অবস্থায় নিউক্লিয়াস থেকে ইলেকট্রনের সর্বাপেক্ষা সম্ভাব্য দূরত্ব বোর ব্যাসার্ধের সমান। (13.4) নং চিত্রে n এবং l এর কয়েকটি মানের জন্য r ব্যাসার্ধের এবং dr বেধের একটি খোলকের মধ্যে একটি হাইড্রোজেন পরমাণুর ইলেকট্রনের অবস্থানের সম্ভাব্যতা অঙ্কিত হয়েছে।



চিত্র 13.4

হাইড্রোজেন পরমাণুর আপজাত্য (Degeneracy in Hydrogen atom)

13.51 সমীকরণে আমরা দেখেছি যে

$$E_n = -\frac{mZ^2e^4}{2n^2\hbar^2} \text{ এবং জানি যে বোর ব্যাসার্ধের মান } a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2}$$

$\therefore$ E_n কে লেখা যায়

$$E_n = -\frac{1}{2}\frac{Ze^2}{\left(\frac{a_0}{Z}\right)}\frac{1}{n^2} \quad \dots\dots(13.56)$$

(13.56) সমীকরণে $\frac{a_0}{Z}$ Ze আধান যুক্ত পরমাণুর প্রথম বোর ব্যাসার্ধের সমান। নিউক্লিয়াস থেকে এই দূরত্বে ভৌম অবস্থার শক্তি E, এই দূরত্বে অবস্থিত একটি ইলেকট্রনের স্থিতিশক্তির মানের অর্ধেক। n এর মান বৃদ্ধির সঙ্গে $|E_n|$ এর মান $\frac{1}{n^2}$ এর সাপেক্ষে হ্রাস পায় এবং $E_n = -|E_n|$ এর মান অপসারী হয়ে $n \to \alpha$ সীমায় $E_n = 0$-তে পৌঁছায়। এক্ষেত্রে অসীম সংখ্যকস্তর দেখা যায় (কেননা কুলম্ব বিভবের মান বৃহৎ এর ক্ষেত্রে খুব ধীরে হ্রাস পায়)।

হাইড্রোজেন পরমাণুতে অবস্থিত ইলেকট্রনের তরঙ্গ অপেক্ষকের রূপ n, l, m তিনটি কোয়ান্টাম সংখ্যার ওপর নির্ভরশীল, কিন্তু শক্তির আইগেনমান নির্ভর করে কেবলমাত্র n এর ওপর। একই n বিশিষ্ট বিভিন্ন অপেক্ষক ψ_{nlm} গুলির শক্তির মানও এক। n এর প্রত্যেকটি মানের জন্য $(n \geq l + 1)$ l এর মান 0 থেকে $(n - 1)$ পর্যন্ত হতে পারে, আবার প্রত্যেকটি l এর জন্য m এর মানের বিস্তার $-l$ থেকে $+l$ পর্যন্ত (শূন্য অন্তর্ভুক্ত)। অর্থাৎ প্রত্যেকটি l এর জন্য চৌম্বক কোয়ান্টাম সংখ্যা (magnetic quantum number) m এর বিভিন্ন মানের সংখ্যা $(2l + 1)$। একটি n এর জন্য প্রত্যেক জোড়া m এবং l এর মান একটি পৃথক আইগেন অপেক্ষক নির্দেশ করে। এটিকে বলা হয় আপজাত্য (degeneracy)। এই অপেক্ষকগুলির সংখ্যা

$$\sum_{l=0}^{n-1}(2l + 1) = 1 + 3 + 5 + \dots + (2n - 1) = n^2$$

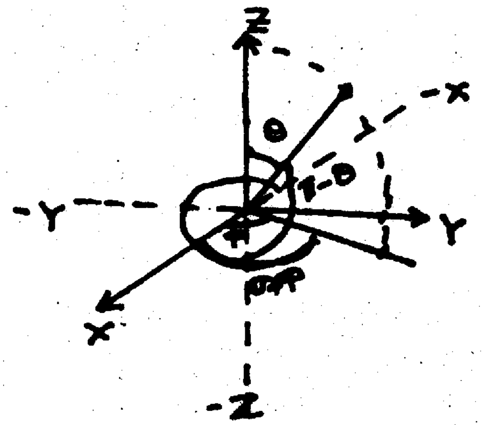
[ওপরের রাশিটি মুখ্য কোয়ান্টাম সংখ্যা n সম্বলিত একটি খোলকে (shell) সর্বাধিক কতকগুলি ইলেকট্রন থাকতে পারে সেটিও নির্দেশ করে]

সুতরাং n এর প্রদত্ত কোন মানের জন্য হাইড্রোজেন সদৃশ পরমাণুর শক্তিস্তরটির আপজাত্যের মাত্রা n^2 (n^2 fold degenerate) কিন্তু ভৌম অবস্থায় $n = 1$ হওয়ায় এই অবস্থাটি আপজাত্য শূন্য। এখানে ইলেকট্রনের স্পিনকে ধরা হয়নি।

m এর মানের $(2l + 1)$ সংখ্যক আপজাত্য গোলীয় প্রতিসাম্যযুক্ত বিভব $V = V(r)$ এর একটি বিশেষত্ব। অপরদিকে l এর মানের n সংখ্যক আপজাত্য গোলীয় প্রতিসাম্যযুক্ত বিভবের বিশেষ কয়েকটি ক্ষেত্রে দেখা যায় (যথা কুলম্ব বিভব)। এটিকে কখনও কখনও আকস্মিক আপজাত্য (accidental degeneracy) বলা হয়।

প্যারিটি (Parity)—কোন দক্ষিণাবর্তী বা বামাবর্তী নির্দেশাঙ্কিত তন্ত্রের (Right handed or left handed coordinate system) প্রতিফলন ঘটালে তন্ত্রের নির্দেশাঙ্কের যে পরিবর্তন হয় তাকে প্যারিটি প্রতিসাম্য বলে। প্রতিফলনের ফলে যদি কোন অপেক্ষক অপরিবর্তিত থাকে, তাহলে তার প্যারিটিকে যুগ্ম (even) বলা হয়। প্রতিফলনের ফলে অপেক্ষকের চিহ্ন ঋণাত্মক হলে তার প্যারিটিকে অযুগ্ম বলা হয়।

হাইড্রোজেন পরমাণুর তরঙ্গ অপেক্ষকগুলি গোলীয় পোলার নির্দেশাঙ্কে প্রকাশ করা হয় বলে দেখা যায় যে কেন্দ্রের সাপেক্ষে তন্ত্রের প্রতিফলনের ফলে θ পরিবর্তিত হয় $(\pi - \theta)$-তে, ϕ পরিবর্তিত হয় $(\pi + \phi)$-তে এবং r এর কোন পরিবর্তন হয় না।



চিত্র 13.5

এই পরিবর্তনের কথা মনে রেখে গোলীয় হারমণিকের পরিবর্তনের রূপ আলোচনা করা যায়।

আমরা পেয়েছি

$$Y_l^m(\theta, \phi) = N_{lm} P_l^m(\omega) e^{im\phi}.$$

এখানে $\omega = \cos\theta$

N_{lm} = প্রমাণীকরণ ধ্রুবক

এবং $P_l^m(\omega)$ = সংশ্লিষ্ট লেজেন্ড্রে বহুপদ

যদি $\hat{P}$ = প্যারিটি সংকারক হয় তবে দেখা যায়

$$\hat{P} Y_l^m(\theta, \phi) = (-1)^l Y_l^m(\theta, \phi)$$

সুতরাং l এর মান 0 অথবা যুগ্ম হলে প্যারিটি সংকারকের (parity operation) দ্বারা তরঙ্গ অপেক্ষকের রূপের কোনও পরিবর্তন হবে না অর্থাৎ এই অপেক্ষকটি যুগ্ম প্যারিটির; l এর মান অযুগ্ম সংখ্যা হলে অপেক্ষকও অযুগ্ম প্যারিটির হবে। অর্থাৎ l এর মানের ওপর তরঙ্গ অপেক্ষকের প্যারিটি নির্ভর করবে।

13.4 সারাংশ

হাইড্রোজেন পরমাণুর গঠনের ধারণা পাওয়ার জন্য ইলেকট্রনের শক্তিস্তর এবং তরঙ্গ অপেক্ষকগুলি জানা প্রয়োজন। ইলেকট্রনের তরঙ্গ অপেক্ষক রূপ নির্ণয় করার জন্য এটিকে r, θ এবং ϕ, তিনটি পৃথক অপেক্ষকের গুণফল হিসাবে প্রকাশ করা প্রয়োজন।

13.5 সর্বশেষ প্রশ্নাবলি

(1) হাইড্রোজেন পরমাণুর $1s$ কক্ষের (orbital) তরঙ্গ অপেক্ষকের রূপ

$$\psi(1, 0, 0) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{\frac{-r}{a_0}}$$

হলে নিউক্লিয়াস থেকে $1s$ ইলেকট্রনের গড় দূরত্ব নির্ণয় করুন। (a_0 = বোর ব্যাসার্ধ)

(2) নিউক্লিয়াসের কুলম্ব ক্ষেত্রে অবস্থিত একটি ইলেকট্রনের বদ্ধ অবস্থায় তরঙ্গ অপেক্ষকের অরীয় অংশ $R(r) = \frac{x(r)}{r}$ এর এ্যাসিমটোটিয় (Aymptotic) রূপ (i) নিউক্লিয়াস থেকে বহু দূরে এবং নিউক্লিয়াসের নিকটে নির্ণয় করুন।

(3) হাইড্রোজেন পরমাণুর $1s$ ইলেকট্রনের স্থিতিশক্তির গড় সম্ভাব্য মান (expectation value) নির্ণয় করুন।

একটি কণা $V(r)$ কেন্দ্রীয় বিভবক্ষেত্রে গতিশীল। এর সময় নিরপেক্ষ শ্রোডিংগার তরঙ্গ সমীকরণের অরীয় রূপ নির্ধারণ করুন। প্রমাণ করুন এই রূপ কোন একমাত্রিক শ্রোডিংগার তরঙ্গ সমীকরণের সহিত সদৃশ যেখানে r এর সীমা $0 \le r \le \alpha$ এবং কার্যকরী বিভব $V_{eff}(r) = V(r) + \frac{\hbar^2 \lambda}{2mr^2}$ যেখানে λ একটি ধ্রুবক।

13.6 উত্তরমালা

(i) গড় সম্ভাব্য দূরত্বের রূপ

$$< r > = \int \psi r \psi dr$$

$$= \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \left(\frac{1}{\pi a_0^3}\right)^{\frac{1}{2}} . e^{\frac{-r}{a_0}} r \left(\frac{1}{\pi a_0^3}\right)^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{r}{a_0}} \times r^2 \sin\theta d\theta d\phi dr$$

$$= \frac{1}{\pi a_0^3}\int_0^{\alpha} r^3 e^{-\frac{2r}{a_0}} dr \int_0^{\pi} \sin\theta d\theta \int_0^{2\pi} d\phi = \frac{3}{2} a_0$$

(ii) অরীয় তরঙ্গ অপেক্ষকের রূপ

$$\frac{\partial^2 R}{\partial r^2} + \frac{2}{\pi}\frac{dR(r)}{dr} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V)R(r) - \frac{l(i+1)}{r^2} R(r) = 0$$

দেওয়া আছে $R(r) = \frac{x(r)}{r}$

∴ আমরা পাই (মান বসিয়ে)

$$\frac{d^2x(r)}{dr^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V)\, x(r) - \frac{l(l+1)}{r^2} x(r) = 0 \qquad \ldots \text{(A)}$$

(i) নিউক্লিয়াস থেকে বহু দূরের অবস্থানে ওপরের সমীকরণের শেষ পদটিকে অগ্রাহ্য করা যায় এবং $V(r)$ এর মানও শূন্য হয়। সুতরাং আমরা লিখতে পারি

$$\frac{d^2x(r)}{dr^2} + k^2 x(r) = 0 \quad \text{যেখানে} \quad K^2 = \frac{2m|E|}{\hbar^2}$$

ওপরের সমীকরণের সমাধানের রূপ

$$x(r) = Ae^{kr} + Be^{-kr}$$

$R(r)$ এর মান অসীম থাকার জন্য A এর মান শূন্য হবে এবং $R(r)\ \alpha e^{-kr/r}$

(ii) নিউক্লিয়াসের কাছে $|E| \approx V(r)$ এবং (A) সমীকরণের রূপ হয়

$$\frac{d^2x(r)}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} x(r) = 0$$

ওপরের সমীকরণের সমাধানের রূপ

$$x(r) = Ar^{\alpha}$$

এই সমাধান ওপরের সমীকরণে বসিয়ে পাই

$$\alpha = (l+1) \text{ এবং } -l$$

$R(r)$ এর মান সসীম হয় যখন $\alpha = l + 1$

সুতরাং $\qquad R(r) \propto r^l$

(3) হাইড্রোজেন পরমাণুর ইলেকট্রনের স্থিতিশক্তির রূপ $V = -\frac{e^2}{r}$ সুতরাং $1s$ অবস্থায় গড় সম্ভাব্য মান

$$
\begin{aligned}
< V > &= \int_0^\infty V|R_{10}(r)|^2 r^2 dr \\
&= -\int_0^\infty \frac{e^2}{r}\left|\frac{2}{a_0^{3/2}}\exp\left(-\frac{r}{a_0}\right)\right|^2 r^2 dr \\
&= -\frac{4e^2}{a_0^3}\int_0^\infty r\exp\left(\frac{-2r}{a_0}\right)dr = -\frac{4e^2}{a_0^3}\frac{1}{(2/a_0)^2} \\
&= -\frac{e^2}{a_0}
\end{aligned}
$$

$$
\therefore\ <V> = -\frac{e^2}{\hbar^2/me^2} = -\frac{me^4}{\hbar^2}
$$

ওপরের মানটি এবং বোরের তত্ত্বের সাহায্যে নির্নীত স্থিতিশক্তির মান সমান।

(4) (13.35) সমীকরণের ব্যাখ্যাটি ধরে উত্তর তৈরী করুন।

NOTE