Oblig 9

Oskar Idland

A Diskusjonsoppgaver

Oppgave 1

a)

Vi kan måle elektronets posisjon x med operatoren $\hat{x}$, bevegelsesmengde p med operatoren $\hat{p}$ og energien E ved operatoren $\hat{H}$.

b)

observabelen x og E har operatorer med egenverdier på følgende form.

$$\hat{x}\psi = x\psi \quad , \quad \hat{H}\psi = E\psi$$

Dette gjelder ikke bevegelsesmengde som et uttrykt på følgende måte.

$$\hat{p}\psi = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\psi$$

c)

Elektronet har bare skarpe verdien for observabelen E og p ettersom elektronet bare kan ha diskrete distanser fra kjernen som gir diskret bevegelsesmengde og energi.

d)

n beskriver energinivået til elektronet og dets distanse fra kjernen. n er alltid et heltall større eller lik 1, ettersom det beskriver elektronskall. Jo høyere n jo lenger unna kjernen.

l beskriver størrelsen på elektronets orbitale angulær moment gitt ved $L = \hbar\sqrt{l(l+1)}$. l er alltid et naturlig tall i intervallet $[0, n-1]$. Tallet forteller oss hvilket underskall elektronet befinner seg i og dets form. Det enkleste eksempelet er når $n = 1$. Da kan l kun være 0. Det innerste skallet har bare et underskall ($1s$). For $n = 2$ kan l være 0 eller 1. Dette er det nest innerste skalle som har to underskall s_2 og p_2.

m er det magnetiske kvantetallet og beskriver antall orbitaler i et underskall, dets orientering samt det orbitale angulær momentet om z-aksen gitt ved $L_z = m\hbar$. m er alltid et heltall i intervallet $[-l, l]$. Hvis $n = 2$ er l enten 0 eller 1. Da kan m være enten -1, 0 eller 1. Dette gir 3 mulige orbitaler i andre energinivå. p_x, p_y & p_0. m påvirker ikke elektronet sin energi med mindre det er i et magnetfelt.

e)

Vi vet at $E_n = -E_0/n^2$. Med $E = -\dfrac{m_e e^2 k_e^2}{18\hbar^2}$ må $n = 3$. Da kan vi finne $l \in [0, 1, 2]$. Vi løser følgende.

$$L^2 = \hbar^2\left(\sqrt{l(l+1)}\right)^2 = 6\hbar^2$$

$$l^2 + l = 6 \quad , \quad l = 2 \ / \ l = -3$$

Bare $l = 2 \in [0, 1, 2]$. Da gjenstår bare $m \in [-2, 2]$. Vi løser følgende.

$$L_z = m\hbar = 3\hbar \quad , \quad m = 3$$

Den eneste løsningen for $m \notin [-2, 2]$. Måleresultatene er dermed ikke gyldig.

B Regneoppgaver

Oppgave 2

a)

Et sentralsymmetrisk potensial $V(r)$ er et potensial som bare er avhengig av avstanden r til kilden til potensialet plassert i origo. Et eksempel på dette er gravitasjonspotensialet, eller den potensielle energien et elektron får fra en positiv partikkel. $Y_l^m(\phi, \theta)$ er den samme enten vi ser på et fritt eller bundet elektron ettersom funksjonen bare er avhengig av vinklene ϕ og θ. Et bundet elektron er bare bundet i avstanden r fra kjernen.

b)

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e}\frac{d^2}{dr^2}rR(r) + \left[-\frac{k_e e^2}{r} + \frac{\hbar^2(l(l+1))}{2m_e r^2}\right] rR(r) = Er(R(r))$$

Vi setter inn den radielle funksjon $R(r) = re^{-\gamma r}$ i venstre side av likningen.

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e}\frac{d^2}{dr^2}r^2 e^{-\gamma r} + \left[-\frac{k_e e^2}{r} + \frac{\hbar^2(l(l+1))}{2m_e r^2}\right] r^2 e^{-\gamma r} = Er^2 e^{-\gamma r} \tag{1}$$

Vi begynner med å derivere $\dfrac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2} r^2 e^{-\gamma r}$

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2} r^2 e^{-\gamma r} = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\left(2re^{-\gamma r} - \gamma r^2 e^{-\gamma r}\right) = e^{-\gamma r}\left(\gamma^2 r^2 - 4\gamma r + 2\right)$$

Vi setter dette tilbake i likning (1).

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e}e^{-\gamma r}\left(\gamma^2 r^2 - 4\gamma r + 2\right) + \left[-\frac{k_e e^2}{r} + \frac{\hbar^2(l(l+1))}{2m_e r^2}\right] r^2 e^{-\gamma r}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e}\left(\gamma^2 r^2 - 4\gamma r + 2\right) + \left[-\frac{k_e e^2}{r} + \frac{\hbar^2(l(l+1))}{2m_e r^2}\right] r^2 = E_n r^2$$

$$-\hbar^2\left(\gamma^2 r^2 - 4\gamma r + 2\right) - 2m_e k_e e^2 r + \hbar^2(l(l+1)) - 2m_e E_n r^2 = 0$$

$$-\hbar^2(-4\gamma r + 2) - 2m_e k_e e^2 r + \hbar^2(l(l+1)) - \left(2m_e E_n - \hbar^2\gamma^2\right) r^2 = 0$$

$$-2\hbar^2 + (4\gamma\hbar^2 - 2m_e k_e e^2)r + \hbar^2(l(l+1)) - \left(2m_e E_n - \hbar^2\gamma^2\right) r^2 = 0$$

$$\underbrace{\hbar^2(l(l+1) - 2)}_{\text{Ledd 1}} + \underbrace{(4\gamma\hbar^2 - 2m_e k_e e^2)r}_{\text{Ledd 2}} - \underbrace{\left(2m_e E_n - \hbar^2\gamma^2\right) r^2}_{\text{Ledd 3}} = 0$$

Hvis likningen skal gjelde for alle r må leddene være lik 0. Vi begynner med ledd 2.

$$4\gamma\hbar^2 - 2m_e k_e e^2 = 0$$

$$\gamma = \frac{m_e k_e e^2}{2\hbar^2}$$

Vi fortsetter med ledd 3.

$$2m_e E_n - \hbar^2\gamma^2 = 0$$

Vi setter inn E_n og γ.

$$2m_e\frac{E_0}{n^2} - \hbar^2\left(\frac{m_e k_e e^2}{2\hbar^2}\right)^2 = 2\frac{E_0}{n^2} - \frac{m_e k_e^2 e^4}{4\hbar^2} = 0$$

$$2m_e\frac{m_e k_e^2 e^4}{2\hbar^2}\frac{1}{n^2} - \frac{m_e k_e^2 e^4}{4\hbar^2} = 0$$

$$\frac{1}{n^2} = \frac{1}{4}$$

$$n = 2$$

Vi avslutter med ledd 1.

$$l(l+1) - 2 = 0$$

$$l_1 = -2 \text{ eller } l_2 = 1$$

Ettersom bare $l_2 \in [0,2]$ er det den eneste løsningen. Da vet vi at $R(r) = re^{-\gamma r}$ er en gyldig løsning for $n = 2$, $l = 1$ og $\gamma = \dfrac{m_e k_e e^2}{2\hbar^2}$.

c)

Vi er vant med å regne i kartesiske koordinater i én dimensjon. Når vi bruker sfæriske koordinater i tre dimensjoner ser utrykket for sannsynlighetsfordelingen litt annerledes ut. Sannsynligheten for å finne elektronet i et volumelement dV er gitt ved $|\Psi|^2\,dV$. I sfæriske koordinater er $dV = r^2\sin\theta\ dr\ d\theta\ d\phi$. Siden vi kan separere løsningen av Schrodinger likningen til en radiell del kan vi se bort ifra sinus utrykket i den radielle delen og får da en radiell sannsynlighet gitt ved.

$$P(r) = |\Psi|^2\, r^2 = r^2 R^2(r)$$

Videre finner vi den mest sannsynlige radiusen.

$$P(r)_{\max} := \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r} r^2 R^2(r) = 0$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r} r^4 e^{-2\gamma r} = 0$$

$$4r^3 e^{-2\gamma r} - 2\gamma r^4 e^{-2\gamma r} = 0$$

$$2r^3 e^{-2\gamma r}(2 - \gamma r) = 0$$

Vi ser vi har en løsing for $r_1 = 2/\gamma$ og for $r_2 = 0$. Vi vet at $r = 0$ ikke er en løsning ettersom partikkelen ikke kan okkupere sentrum av atomet.

$$r = \frac{2}{\gamma} = \frac{4\hbar^2}{m_e k_e e^2} = 4a_0$$