KVANTRÖV 5

Anders

Kom ihåg: S.E. $\hat{H}\Psi(x,t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t)$

$$\hat{H} = \underbrace{\frac{p^2}{2m}}_{E_k} + \underbrace{V}_{E_p} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(r,t)$$

tidsoberoende pot.: $\hat{H}u(x) = Eu(x)$ för tidsober. $u(x)$

$$\Rightarrow \Psi(x,t) = u(x)\, e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$$

- Fysikaliska tillstånd repr. av en vågfunktion
- En (mätbar) fysikalisk kvantitet repr. av en (hermitesk) operator
- Egenvärdena av en operator är de möjliga resultaten av en mätning av motsv. kvantitet

<u>Kap. 8</u> <u>Centralfält $V = V(r)$</u>

Inför sfäriska koord. och lös S.E.

$$\Rightarrow \Psi_{nlm}(r,\theta,\varphi) = R_{nl}(r)\, Y_{lm}(\theta,\varphi)$$

Y_{lm} är klotytfunktioner ("spherical harmonics")

$$Y_{lm}(\theta,\varphi) = N_{lm}\underbrace{P_l^m(\cos\theta)}_{\text{ass. legendrepolynom}} e^{im\varphi}$$

Kvanttal	n	energi	$\hat{H}\Psi_{nlm} = E_n\Psi_{nlm}$
	l	rörelsem.m.	$L^2\Psi_{nlm} = \hbar^2 l(l+1)\Psi_{nlm}$
	m	magn.	$L_z\Psi_{nlm} = \hbar m\Psi_{nlm}$

VIII 1 Visa $[L_\alpha, L_\beta] = i\hbar L_\gamma$ m.h.a. $\hat{\mathbb{L}} = \hat{r} \times \hat{\mathbb{p}}$

$$\hat{\mathbb{L}} = \begin{vmatrix} \hat{x} & \hat{y} & \hat{z} \\ x & y & z \\ p_x & p_y & p_z \end{vmatrix} = (yp_z - zp_y)\hat{x} + (zp_x - xp_z)\hat{y} + (xp_y - yp_x)\hat{z}$$

$$= L_x \hat{x} + L_y \hat{y} + L_z \hat{z}$$

Kommuteringsregler: $[A,B] = AB - BA$ (def.)

I $\Rightarrow [A,B] = -[B,A]$

II $[A+B, C] = [A,C] + [B,C]$

III $[AB, C] = A[B,C] + [A,C]B$

Spec. för x, p: $[x_\alpha, x_\beta] = 0$, $[p_\alpha, p_\beta] = 0$, $[x_\alpha, p_\beta] = i\hbar\delta_{\alpha\beta}$

Nu: $[L_x, L_y] = [yp_z - zp_y, zp_x - xp_z] =$

$$= [yp_z, zp_x] - \underbrace{[yp_z, xp_z]}_{=0} - \underbrace{[zp_y, zp_x]}_{=0} + [zp_y, xp_z] =$$

[III] $$= y[p_z, zp_x] + \underbrace{[y, zp_x]}_{=0}p_z + z\underbrace{[p_y, xp_z]}_{=0} + [z, xp_z]p_y =$$

$$= y[p_z, z]p_x + 0 + 0 + x[z, p_z]p_y = -i\hbar yp_x + i\hbar xp_y =$$

$$= i\hbar L_z$$ De övriga fås genom permutationer av (x, y, z)

Det faktum att $[L_\alpha, L_\beta] \neq 0$ innebär att en partikel inte kan ha samtliga komponenter av rörelsemängdsmom. $\mathbb{L}$ bestämda samtidigt!

III 4

$\psi(x,y,z) = (x+y+z)e^{-\alpha r}$, där $r = \sqrt{x^2+y^2+z^2}$, $\alpha > 0$

Beräkna $\langle \mathbb{L}^2 \rangle = \int \psi^* \mathbb{L}^2 \psi \, d^3x$. Behöver alltså $\mathbb{L}^2\psi$.

$\mathbb{L}^2\psi$ kan bestämmas genom att uttrycka $\mathbb{L}^2$ i diff. operatorer m.a.p. θ & φ ...

$(\mathbb{L} = \mathbb{r} \times \mathbb{p} \Rightarrow \mathbb{L}^2 = (\mathbb{r}\times\mathbb{p})^2 = r^2p^2(1-\cos^2\alpha) =$

$= r^2p^2 - (\mathbb{r}\cdot\mathbb{p})^2 \ldots \Rightarrow \mathbb{L}^2 = -\hbar^2\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]$

... och sedan uttrycka ψ i polära koordinater.
Man får då ett gäng derivator att beräkna.
Detta är inte svårt, men ganska jobbigt.

Alternativ: Var listig och använd klotytfunktioner Y_{lm}. De bildar bas på enhetssfären, så det går.

koordinatbyte

$\mathbb{L}^2\Psi_{nlm} = \hbar^2 l(l+1)\Psi_{nlm}$

$Y_{00} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$

$Y_{10} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\frac{z}{r}$

kompendium sida 77

$Y_{1,\pm1} = \mp\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta e^{\pm i\varphi} = \mp\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\left(\frac{x \pm iy}{r}\right)$

$\Rightarrow x = \frac{r}{2}\sqrt{\frac{8\pi}{3}}\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\left(\frac{-(-x-iy)+(x-iy)}{r}\right) =$

$= \frac{r}{2}\sqrt{\frac{8\pi}{3}}\left(-Y_{1,+1} + Y_{1,-1}\right)$

$y = \frac{r}{2i}\sqrt{\frac{8\pi}{3}}\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\left(\frac{-(-x-iy)-(x-iy)}{r}\right) =$

$= \frac{r}{2i}\sqrt{\frac{8\pi}{3}}\left(-Y_{1,+1} - Y_{1,-1}\right)$

$z = r\sqrt{\frac{4\pi}{3}}\left(\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\frac{z}{r}\right) = r\sqrt{\frac{4\pi}{3}}Y_{10}$

$re^{-\alpha r}$

$\Rightarrow \psi(x,y,z) = \left[\frac{1}{2}\sqrt{\frac{8\pi}{3}}\left(-Y_{1,+1} + Y_{1,-1}\right) + \frac{1}{2i}\sqrt{\frac{8\pi}{3}}\left(-Y_{1,+1} - Y_{1,-1}\right) + \sqrt{\frac{4\pi}{3}}Y_{10}\right] re^{-\alpha}$

... ψ är en linj. komb. av klotytfunktioner med $\underline{\underline{l=1}}$

ψ beskriver alltså ett tillstånd m. l-kvanttalet 1

Vi vet att $\mathbb{L}^2\psi_{nlm} = \hbar^2 l(l+1)\psi_{nlm} \Leftrightarrow \underline{\underline{\mathbb{L}^2\psi_{n1m} = 2\hbar^2\psi_{n1m}}}$

$$\Rightarrow \langle \mathbb{L}^2 \rangle = \int \psi^* \mathbb{L}^2 \psi \, d^3r = 2\hbar^2 \underbrace{\int \psi^*\psi \, d^3r}_{=1\ (\text{norm.})} = \underline{\underline{2\hbar^2}}$$

Kap. 9 VÄTEATOMEN

TOSE; m. $\hat{H} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(r)\right)$, där

$V(r) = \text{Coulombpot.} = -\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r}$

Vinkeldelen är löst "en gång för alla" $\Rightarrow Y_{lm}$

Radiella delen: ~~tar~~ $f(r) = rR(r)$ $\qquad (\psi(r,\theta,\varphi) = R(r)Y_{lm})$

S.E. $$\frac{d^2f}{dr^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2}\left[E - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} + \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\right]f = 0$$

(Alltså: denna ekvation använder $rR(r) = f$, inte bara $R(r)$)

IX 1

Vågfkn för H-atomens grundtillst.: $\psi(r) = Ae^{-\alpha r}$

Bestäm α & A. Skriv $f(r) = rR(r) = r\psi(r) = rAe^{-\alpha r}$

och sätt in i S.E.:

$$\frac{d^2f}{dr^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2}\left[E - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} + \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\right]f = 0$$

$$\left\{\begin{aligned} \frac{df}{dr} &= (1-r\alpha)Ae^{-\alpha r} \\ \frac{d^2f}{dr^2} &= (r\alpha^2 - 2\alpha)Ae^{-\alpha r} \end{aligned}\right.$$

Grundtillstånd $\Rightarrow n=1, l=1$ (m=0)

Vet också $Z=1$. S.E. blir nu:

$$\boxed{(r\alpha^2 - 2\alpha)Ae^{-r\alpha} + \frac{2\mu}{\hbar^2}\left(E_{100} + \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\right)rAe^{-r\alpha} = 0}$$

...

identifiera r^1-del och r^0-del var för sig:

$\underline{\underline{r^1}}$: $\alpha^2 rAe^{-r\alpha} + \frac{2\mu}{\hbar^2}E_{100}\, rAe^{-r\alpha} = 0 \Leftrightarrow E_{100} = -\frac{\hbar^2\alpha^2}{2\mu}$

$\underline{\underline{r^0}}$: $-2\alpha Ae^{-r\alpha} + \frac{2\mu e^2}{\hbar^2 4\pi\varepsilon_0}Ae^{-r\alpha} = 0 \Leftrightarrow \alpha = \frac{\mu e^2}{4\pi\varepsilon_0\hbar^2} \equiv \frac{1}{a_0}$

a_0 = bohrradien

Alltså: $E_{100} = -\frac{\hbar^2}{2\mu a_0^2}$ & $\alpha = \frac{1}{a_0}$

Normering: $1 = \int|\psi|^2 d^3r = \int_0^{2\pi}\int_0^{\pi}\int_0^{\infty} A^2e^{-2\alpha r}r^2\sin\theta\, dr\, d\theta\, d\varphi =$

$= \underbrace{\int d\Omega}_{=4\pi}\int_0^\infty A^2e^{-2\alpha r}r^2dr = 4\pi A^2\int_0^\infty r^2e^{-2\alpha r} = 4\pi A^2\frac{2}{(2\alpha)^3} \Leftrightarrow A = \sqrt{\frac{\alpha^3}{\pi}} = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}}$

BETA

Alltså: $\psi(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}}e^{-r/a_0}$

IX 2

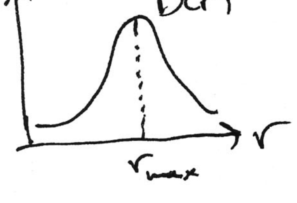
Vi söker mest sannolika avstånd från kärnan för H:

a) 1s-tillståndet $(n=1, l=0)$

Sannolikhetstäthet: $\psi^*_{100}(r)\psi_{100}(r) \overset{\text{IX 1}}{=} \frac{1}{\pi a_0^3}e^{-2r/a_0} = P(r)$

$P(r)\,dV = P(r)\,r^2dr\,d\Omega$

$D(r) = \underbrace{\int d\Omega}_{4\pi}\, P(r)\, r^2$ (radiell fördelningsfunktion)



Finn max: $\frac{dD}{dr} = 0$

$D'(r) = \frac{8r}{a_0^3}\left(1 - \frac{r}{a_0}\right)e^{-2r/a_0}$

$D'(r_{max}) = 0 \Rightarrow \underline{\underline{r_{max} = a_0}}$

...

... b) 2s-tillståndet $(n=2, l=0)$

$$\Rightarrow \psi_{200} = R_{20} Y_{00} = \{\text{Ph. HB}\} = \frac{1}{2\sqrt{2}}\left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2}\left(2-\frac{r}{a_0}\right)e^{-r/2a_0}\frac{1}{\sqrt{4\pi}}$$

$$\Rightarrow D_{200}(r) = 4\pi r^2 \psi_{200}^* \psi_{200} = 4\pi r^2 \frac{1}{8}\left(\frac{1}{a_0}\right)^3\left(2-\frac{r}{a_0}\right)^2 e^{-\frac{r}{a_0}}\frac{1}{4\pi}$$

(ser nu ett minimum vid $r = 2a_0$ ...)

$$\frac{dD_{200}(r)}{dr} = 0 \Leftrightarrow \frac{(2a_0 - r)\, r\,(4a_0^2 - 6a_0 r + r^2)}{a_0^3} e^{-r/a_0} = 0$$

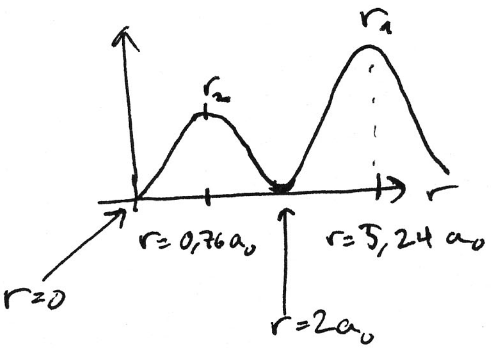
4 lösn.: $r=0$, $r=2a_0$ (minimum) och:

$$r^2 - 6a_0 r + 4a_0^2 = 0 \Leftrightarrow r = 3a_0 \pm \sqrt{9a_0^2 - 4a_0^2} = 3a_0 \pm \sqrt{5}\, a_0$$

$$\Rightarrow \begin{cases} r_1 = 5{,}24\, a_0 \\ r_2 = 0{,}76\, a_0 \end{cases}$$

$\frac{d^2 D_{200}(r_1, r_2)}{dr} < 0$

$\Rightarrow$ maxpkter



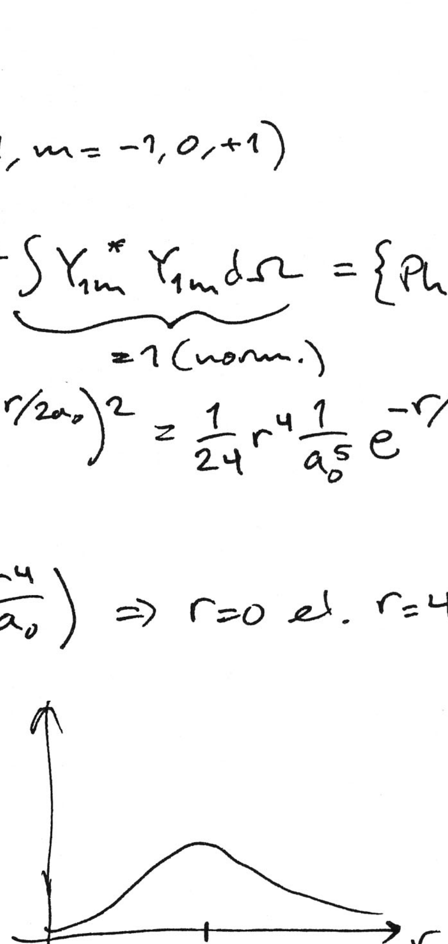
c) något av 2p-tillstånden $(n=2, l=1, m=-1,0,+1)$

$$D_{21m}(r) = \int |\psi_{21m}|^2 r^2 d\Omega = r^2 |R_{21}|^2 \underbrace{\int Y_{1m}^* Y_{1m} d\Omega}_{=1 \text{ (norm.)}} = \{\text{Ph. HB}\}$$

$$= r^2 |R_{21}|^2 = r^2\left(\frac{1}{2\sqrt{6}}\left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2}\frac{r}{a_0}e^{-r/2a_0}\right)^2 = \frac{1}{24} r^4 \frac{1}{a_0^5} e^{-r/a_0}$$

$$\Rightarrow \frac{dD_{21m}}{dr} = 0 = \frac{1}{24a_0^5} e^{-r/a_0}\left(4r^3 - \frac{r^4}{a_0}\right) \Rightarrow r=0 \text{ el. } r = 4a_0$$

andraderivatan ~~positiv~~ negativ $\Rightarrow$ maxpkt



X 5) $\langle r \rangle$ & $\langle \frac{1}{r} \rangle$ för H i gr. tillst.

Vet nu att $\psi_{100} = 2\left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2} e^{-r/a_0} Y_{00}(\theta,\varphi)$

$$\Rightarrow \langle r \rangle = \int \psi^* r \psi \, dV = \frac{4}{a_0^3} \iint r e^{-2r/a_0} Y_{00}^* Y_{00} \, r^2 \, dr \, d\Omega =$$

$$= \frac{4}{a_0^3} \underbrace{\int Y_{00}^*(\theta,\varphi) Y_{00}(\theta,\varphi) \, d\Omega}_{=1 \text{ (norm.)}} \int_0^\infty r^3 e^{-2r/a_0} \, dr = \{\text{BETA}\} =$$

$$= \frac{4}{a_0^3} \frac{3!}{\left(-\frac{2}{a_0}\right)^4} = \frac{3}{2} a_0 \qquad (\neq a_0, \text{ det mest } \underline{\text{sannolika}} \text{ tillst.}$$

$$\text{P.S.S. } \langle \tfrac{1}{r} \rangle = \int \psi^* \frac{1}{r} \psi \, d^3x = \frac{4}{a_0^3} \int_0^\infty r e^{-2r/a_0} \, dr = \frac{1}{a_0}$$

IX 8) Positronium e^- & e^+ Sökt: sannolikhet för $r<d$, $d = 2\,\text{fm}$

$$P(r<d) = \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} \int_0^{d} \psi^* \psi \, r^2 \sin\theta \, dr \, d\theta \, d\varphi$$

Grundtillst. precis som för väte: $\psi_{100} = R_{10}(r) Y_{00}(\theta,\varphi) =$

$$= 2\left(\frac{1}{a_0'}\right)^{3/2} e^{-r/a_0'} Y_{00},$$

<u>men</u> med en annan Bohrradie! Nu: $a_0' = \frac{4\pi\varepsilon_0 \hbar^2}{\mu e^2}$, där $\mu = \frac{m_e}{2}$

$$\Rightarrow a_0' = 2a_0 = 1{,}06\,\text{Å}$$

$$\Rightarrow P(r<d) = \underbrace{\int Y_{00}^* Y_{00} \, d\Omega}_{=1} \int_0^d r^2 \frac{4}{a_0'^3} e^{-2r/a_0'} = \frac{4}{a_0'^3} \left[\frac{e^{-2r/a_0'}}{(-2/a_0')^3} \left(\left(\frac{2}{a_0'}\right)^2 r^2 + \frac{4}{a_0'} r + \ldots \right. \right.$$

$$= -\frac{1}{2}\left(e^{-2d/a_0'} \left(4\left(\frac{d}{a_0'}\right)^2 + 4\left(\frac{d}{a_0'}\right) + 2 \right) - 2 \right) = \left\{ \begin{array}{l} a_0' = 1{,}06\,\text{Å} \\ d = 2\,\text{fm} \end{array} \right\} \doteq \underline{\underline{9 \cdot 10^{-15}}}$$