Moderna fizika

14. 1. 2014

1.12.KM: Vrtilna količina, vodikov atom

Elektron v vodikovem atomu opiše hamiltonka

$$\hat{H} = \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m} - \frac{Ze_0^2}{4\pi\epsilon_o \hat{r}}. \tag{1}$$

Operator gibalne količine v krogelnih koordinatah da

$$\frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2mr^2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\left(r^2\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\right) + \frac{\hat{L}^2}{2mr^2}, \tag{2}$$

kjer je $\hat{L}$ operator tirne vrtilne količine. Lastna stanja vrtilne količine opišemo s kvantnima številoma l, m, tako da je lastna vrednost operatorja $\hat{L}^2$ enaka $\hbar^2 l(l+1)$, lastna vrednost projekcije pa $\hbar m$. Lastne funkcije operatorja vrtilne količine v 3D so sferni harmoniki, Y_{lm}.
Elektron v vodikovem atomu ima v lastnem stanju energijo

$$E_n = -\frac{me_0^4 Z^2}{32\pi^2\hbar^2\epsilon_0^2 n^2}, \tag{3}$$

odvisno le od glavnega kvantnega števila. Stanje opiše valovna funkcija

$$\psi_{nlm}(r,\vartheta,\varphi) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\vartheta,\varphi). \tag{4}$$

Radialni del je

$$R_{nl}(r) = \sqrt{\left(\frac{2}{a_0 n}\right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n[(n+1)!]^3}}\mathrm{e}^{-r/a_0 n}\left(\frac{2r}{a_0 n}\right)^l L_{n-l-1}^{2l+1}(2r/a_0 n), \tag{5}$$

kjer je $a_0 = \sqrt{\hbar^2/2m(-E_n)}/n$ Bohrov radij. Kotni del pa opišejo sferni harmoniki.

1. Vodikov atom je v nestacionarnem stanju z valovno funkcijo

$$\psi = A\left[R_{20}Y_{0,0} + \frac{1}{\sqrt{2}}R_{21}(Y_{1,1} - Y_{1,-1})\right](|\uparrow\rangle + 2|\downarrow\rangle).$$

   (a) S kolikšno verjetnostjo izmerimo pri merjenju velikosti vrtilne količine vrednost $\hbar\sqrt{2}$?

   (b) Kolikšni sta pričakovani vrednosti komponente vrtilne količine vzdolž osi z in velikosti vrtilne količine?

   (c) Kolikšna je pričakovana vrednost komponente spina S_x?

2. Kolikšna sta povprečna vrednost in koren povprečne vrednosti kvadrata oddaljenosti elektrona od jedra vodika v osnovnem stanju?

3. Kolikšna je povprečna potencialna energija elektrona v atomu vodika v osnovnem stanju?

4. Kolikšna je verjetnost, da naletimo v vodikovem atomu na elektron v osnovnem stanju zunaj krogle z radijem, ki je enak povprečni oddaljenosti elektrona od jedra?

5. V danem trenutku opišemo elektron v vodikovem atomu z valovno funkcijo, ki je sorazmerna z R_1+R_2. Poiščite ortogonalno valovno funkcijo! Kolikšno je razmerje med povprečno energijo v navedenem stanju in povprečno energijo v ortogonalnem stanju?

Table 1: Wave functions and their components

n	ℓ	m	$R_{n\ell}$	$Y_{\ell m}$	$\psi_{n\ell m} = R_{n\ell}Y_{\ell m}$
1	0	0	$2\left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2}e^{-r/a_0}$	$\frac{1}{2\sqrt{\pi}}$	$\frac{1}{\sqrt{\pi}}\left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2}e^{-r/a_0}$
2	0	0	$\left(\frac{1}{2a_0}\right)^{3/2}\left(2-\frac{r}{a_0}\right)e^{-r/2a_0}$	$\frac{1}{2\sqrt{\pi}}$	$\frac{1}{4\sqrt{2\pi}}\left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2}\left(2-\frac{r}{a_0}\right)e^{-r/2a_0}$
2	1	0	$\left(\frac{1}{2a_0}\right)^{3/2}\frac{1}{\sqrt{3}}\frac{r}{a_0}e^{-r/2a_0}$	$\frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{\pi}}\cos\theta$	$\frac{1}{4\sqrt{2\pi}}\left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2}\frac{r}{a_0}e^{-r/2a_0}\cos\theta$
2	1	±1	$\left(\frac{1}{2a_0}\right)^{3/2}\frac{1}{\sqrt{3}}\frac{r}{a_0}e^{-r/2a_0}$	$\pm\frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{2\pi}}\sin\theta e^{\pm i\phi}$	$\frac{1}{8}\sqrt{\frac{1}{\pi}}\left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2}\frac{r}{a_0}e^{-r/2a_0}\sin\theta e^{\pm i\phi}$
3	0	0	$2\left(\frac{1}{3a_0}\right)^{3/2}\left(1-\frac{2}{3}\frac{r}{a_0}+\frac{2}{27}(r/a_0)^2\right)e^{-r/3a_0}$	$\frac{1}{2\sqrt{\pi}}$	$\frac{1}{81\sqrt{3\pi}}\left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2}\left(27-18\frac{r}{a_0}+2(r/a_0)^2\right)e^{-r/3a_0}$
3	1	0	$\left(\frac{1}{3a_0}\right)^{3/2}\frac{4\sqrt{2}}{3}\left(1-\frac{1}{6}\frac{r}{a_0}\right)\frac{r}{a_0}e^{-r/3a_0}$	$\frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{\pi}}\cos\theta$	$\frac{1}{81}\sqrt{\frac{2}{\pi}}\left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2}\left(6-\frac{r}{a_0}\right)\frac{r}{a_0}e^{-r/3a_0}\cos\theta$
3	1	±1	$\left(\frac{1}{3a_0}\right)^{3/2}\frac{4\sqrt{2}}{3}\left(1-\frac{1}{6}\frac{r}{a_0}\right)\frac{r}{a_0}e^{-r/3a_0}$	$\pm\frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{2\pi}}\sin\theta e^{\pm i\phi}$	$\frac{1}{81\sqrt{\pi}}\left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2}\left(6-\frac{r}{a_0}\right)\frac{r}{a_0}e^{-r/3a_0}\sin\theta e^{\pm i\phi}$
3	2	0	$\left(\frac{1}{3a_0}\right)^{3/2}\frac{2\sqrt{2}}{27\sqrt{5}}\left(\frac{r}{a_0}\right)^2e^{-r/3a_0}$	$\frac{1}{4}\sqrt{\frac{5}{\pi}}(3\cos^2\theta-1)$	$\frac{1}{81\sqrt{6\pi}}\left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2}\frac{r^2}{a_0^2}e^{-r/3a_0}(3\cos^2\theta-1)$
3	2	±1	$\left(\frac{1}{3a_0}\right)^{3/2}\frac{2\sqrt{2}}{27\sqrt{5}}\left(\frac{r}{a_0}\right)^2e^{-r/3a_0}$	$\pm\frac{1}{2}\sqrt{\frac{15}{2\pi}}\sin\theta\cos\theta e^{\pm i\phi}$	$\frac{1}{81\sqrt{\pi}}\left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2}\left(\frac{r}{a_0}\right)^2e^{-r/3a_0}\sin\theta\cos\theta e^{\pm i\phi}$
3	2	±2	$\left(\frac{1}{3a_0}\right)^{3/2}\frac{2\sqrt{2}}{27\sqrt{5}}\left(\frac{r}{a_0}\right)^2e^{-r/3a_0}$	$\frac{1}{4}\sqrt{\frac{15}{2\pi}}\sin^2\theta e^{\pm 2i\phi}$	$\frac{1}{162\sqrt{\pi}}\left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2}\left(\frac{r}{a_0}\right)^2e^{-r/3a_0}\sin^2\theta e^{\pm 2i\phi}$

$$Y_0^0(\theta,\varphi) = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{1}{\pi}}$$
$$Y_1^{-1}(\theta,\varphi) = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{2\pi}}\,\sin\theta\,e^{-i\varphi}$$
$$Y_1^{0}(\theta,\varphi) = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{\pi}}\,\cos\theta$$
$$Y_1^{1}(\theta,\varphi) = \frac{-1}{2}\sqrt{\frac{3}{2\pi}}\,\sin\theta\,e^{i\varphi}$$
$$Y_2^{-2}(\theta,\varphi) = \frac{1}{4}\sqrt{\frac{15}{2\pi}}\,\sin^2\theta\,e^{-2i\varphi}$$
$$Y_2^{-1}(\theta,\varphi) = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{15}{2\pi}}\,\sin\theta\,\cos\theta\,e^{-i\varphi}$$
$$Y_2^{0}(\theta,\varphi) = \frac{1}{4}\sqrt{\frac{5}{\pi}}\,(3\cos^2\theta - 1)$$
$$Y_2^{1}(\theta,\varphi) = \frac{-1}{2}\sqrt{\frac{15}{2\pi}}\,\sin\theta\,\cos\theta\,e^{i\varphi}$$
$$Y_2^{2}(\theta,\varphi) = \frac{1}{4}\sqrt{\frac{15}{2\pi}}\,\sin^2\theta\,e^{2i\varphi}$$