LØYSING ØVING 12

Løysing oppgåve 1 Vinkelfunksjonar, radialfunksjonar og orbitalar for hydrogenliknande system

a) Ved kontroll av eigenverdiane kan vi sjå bort frå normeringsfaktorane. Vi finn då at

$$\begin{aligned}\widehat{\mathbf{L}}^2\cos\theta &= -\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}+\cot\theta\,\frac{\partial}{\partial\theta}+\frac{1}{\sin^2\theta}\,\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right)\cos\theta \\ &= -\hbar^2\left(-cos\theta+\frac{\cos\theta}{\sin\theta}\cdot(-\sin\theta)+0\right)=2\hbar^2\,\cos\theta.\end{aligned}$$

Konklusjonen er at $\cos\theta$ (og dermed Y_{10}) er ein eigenfunksjon til $\hat{\mathbf{L}}^2$ med eigenverdi $2\hbar^2$. Dette stemmer med fasiten, som seier at eigenverdien skal vere $\hbar^2 l(l+1)=\hbar^2\cdot 1\cdot(1+1)=2\hbar^2$. Tilsvarande finn vi at

$$\hat{L}_z\,\cos\theta=\frac{\hbar}{i}\,\frac{\partial}{\partial\phi}\,\cos\theta=0;$$

eigenverdien er altså lik null, som stemmer med fasiten $m\hbar$ for $m=0$.

For $Y_{1\pm1}$ finn vi på same måte

$$\widehat{L}_z\,\sin\theta\,e^{\pm i\phi}=\frac{\hbar}{i}\,\frac{\partial}{\partial\phi}\sin\theta\,e^{\pm i\phi}=\pm\hbar\cdot\sin\theta\,e^{\pm i\phi},$$

som stemmer med fasiten $m\hbar$ for $m=\pm1$. Vidare finn vi

$$\begin{aligned}\widehat{\mathbf{L}}^2\,\sin\theta\,e^{\pm i\phi} &= -\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}+\cot\theta\,\frac{\partial}{\partial\theta}+\frac{1}{\sin^2\theta}\,\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right)\sin\theta\,e^{\pm i\phi} \\ &= -\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}+\cot\theta\,\frac{\partial}{\partial\theta}+\frac{1}{\sin^2\theta}\cdot(-1)\right)\sin\theta\,e^{\pm i\phi} \\ &= -\hbar^2\left(-\sin\theta+\frac{\cos\theta}{\sin\theta}\,\cos\theta-\frac{1}{\sin\theta}\right)e^{\pm i\phi} \\ &= -\hbar^2\left(-\sin\theta+\frac{-\sin^2\theta}{\sin\theta}\right)e^{\pm i\phi}=2\hbar^2\cdot\sin\theta\,e^{\pm i\phi}.\end{aligned}$$

Altså er $\sin\theta\,e^{\pm i\phi}$ (og dermed $Y_{1\pm1}$) eigenfunksjonar til $\hat{\mathbf{L}}^2$ med eigenverdi lik $2\hbar^2$, slik fasiten seier.

Kontroll av normeringa:

$$\begin{aligned}\int|Y_{10}|^2d\Omega &= \frac{3}{4\pi}\int_0^{2\pi}d\phi\int_0^{\pi}\cos^2\theta\cdot\sin\theta d\theta \qquad [\sin\theta d\theta=-d(\cos\theta)] \\ &= \frac{3}{2}\int_{-1}^{1}\cos^2\theta\cdot d(\cos\theta)=1.\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\int|Y_{1\pm1}|^2d\Omega &= \frac{3}{8\pi}\int_0^{2\pi}d\phi\int_0^{\pi}\sin^2\theta\cdot\sin\theta d\theta \\ &= \frac{3}{4}\int_{-1}^{1}(1-\cos^2\theta)d(\cos\theta)=1.\end{aligned}$$

Ortogonaliteten følgjer av at dei tre funksjonane er eigenfunksjonar til $\hat{L}_z$ med forskjellige eigenverdiar; jf regel (2.26) side 28 i boka.

b) Erfaringa frå eindimensjonale energieigenverdi-problem er at krumninga og dermed energien aukar med talet på nodar. Sidan radiallikninga for $u(r)$ for ein bestemt l har eindimensjonal form, er det då heilt naturleg at energiane er strengt stigande med stigande radialkvantetal (nodetal) n_r.

Med $u = Cr^2 e^{-r/2a}$ finn vi at

$$u' = Ce^{-r/2a}\left(-\frac{r^2}{2a} + 2r\right) \quad \text{og} \quad u'' = Ce^{-r/2a}\left(\frac{r^2}{4a^2} - \frac{2r}{a} + 2\right).$$

Innsett i radiallikninga for u gjev dette

$$\begin{aligned} 0 &= Ce^{-r/2a}\left[-\frac{\hbar^2}{2m_e}\left(\frac{r^2}{4a^2} - \frac{2r}{a} + 2\right) + r^2\left(-\frac{\hbar^2}{m_e a r} + \frac{2\hbar^2}{2m_e r^2}\right) - Er^2\right] \\ &= Ce^{r/2a}\left[r^2\left(-\frac{\hbar^2}{8m_e a^2} - E\right)\right]. \end{aligned}$$

Konklusjonen er at u er ei løysing av radialikninga, med energieigenverdien

$$E = -\frac{\hbar^2}{8m_e a^2},$$

som er ein firedel av energien i grunntilstanden, og som svarer til hovudkvantetallet $n = 2$.

Normeringskravet er

$$1 = \int |\psi_{21m}|^2 d^3r = \int |Y_{1m}|^2 d\Omega \cdot \int_0^\infty |R(r)|^2 r^2 dr.$$

Då vinkelfunksjonane er normerte til 1, blir normeringskravet til radialfunksjonane

$$1 = \int_0^\infty r^2|R|^2 dr = \int_0^\infty |u|^2 dr = |C|^2 \int_0^\infty r^4 e^{-r/a} dr = |C|^2 a^5 \cdot 4!.$$

Vi oppnår ein normert radialfunksjon ved å velge

$$C = \frac{1}{\sqrt{24a^5}}.$$

Ved å samanlikne vil du sjå at dette stemmer med formlane side 107 i boka (og med tabellen i oppgåveteksten).

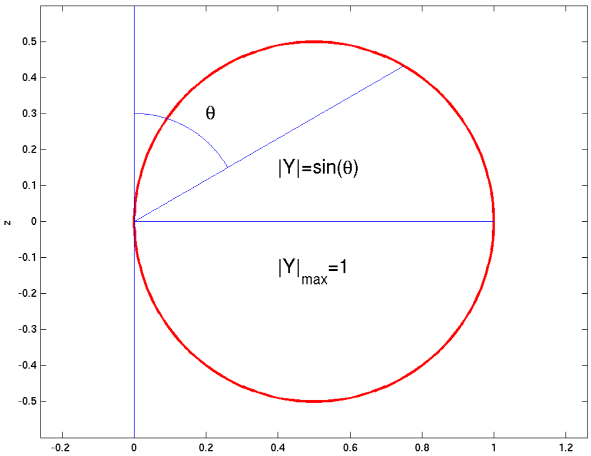
For R_{53} er talet på nodar $n_r = n - l - 1 = 5 - 3 - 1 = 1$, så denne gjev opphav til éi kuleform nodeflate. R_{21} er fri for nodar, og gjev difor inga kuleforma nodeflate. For R_{54} er radialkvantetalet tilsvarande $n_r = 0$, så denne radialfunksjonen gjev ikkje opphav til noka (kuleforma) nodeflate.

Frå formelen $n = l + 1 + n_r$ følgjer det at den største l-verdien for eit bestemt hovudkvantetal er $l_{\max} = n - 1$. Den *minste* l-verdien er lik null. Altså kan radialkvantetalet n_r maksimalt vere lik $n - 1$. (Jf tabellen med radialfunksjonar.)

c) Dei sfæriske harmoniske Y_{lm} er avhengig av ϕ via faktoren $e^{im\phi}$. For $m = 0$ er altså funksjonane Y_{l0} uavhengige av ϕ, dvs rotasjonssymmetriske mop z-aksen. Det samme gjeld openbert for *talverdiane* $|Y_{lm}|$ av dei sfæriske harmoniske, og dermed også for $|\psi_{nlm}|$ og sannsynleghetstettheitene $|\psi_{nlm}|^2$.

Vinkelfunksjonen i polardiagrammet er forskjellig frå null for $\theta = 0$, og må såleis ha $m = 0$ (sidan Y_{lm} er proporsjonal med $\sin^{|m|}\theta$). Då den er lik null berre for $\theta = \pi/2$, må det vere $\cos\theta$; altså manglar berre faktoren $\sqrt{3/4\pi}$ på at det er Y_{10}. (Alle dei øvrige funksjonane Y_{l0} inneheld polynom av høgare grad i $\cos\theta$, og er difor lik null for fleire vinklar θ.)

Funksjonen $\sqrt{4\pi/3}\,Y_{10} = \cos\theta$ er positiv (negativ) for positive (negative) z.

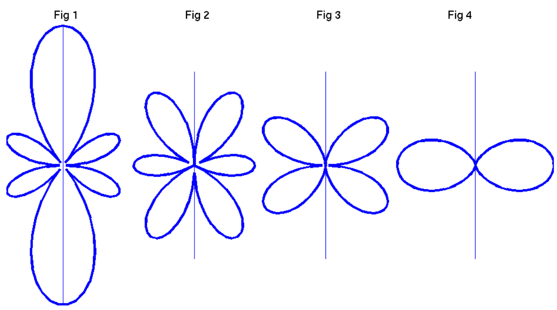


Figuren viser polardiagrammet for funksjonen

$$\sqrt{3/8\pi}\,|Y_{1,\pm1}| = \sin\theta,$$

denne gangen berre for $0 < \theta < \pi$. Som du sikkert skjønar, er også dette ein sirkel. Når vi roterer ein sirkel rundt z-aksen, får vi ein torus (smultring).

d)



I figur 1 er $m = 0$ sidan $|Y|$ er forskjellig frå null for $\theta = 0$. Vi ser vidare at $|Y|$ er lik null for tre verdiar av θ i intervallet $0 < \theta < \pi$. Vi har altså $l - |m| = 3$, for $\theta = \frac{1}{2}\pi$ og for to andre vinklar, i nærleiken av 40–50 grader og π – 40-50 grader. Graden av polynomet i $\cos\theta$ er såleis lik 3, slik at $l - |m| = \underline{l = 3}$. Så polardiagrammet til venstre viser vinkelfordelinga $|Y_{30}|$. I tabellen ser vi at Y_{30} er proporsjonal med $\cos\theta(5\cos^2\theta - 3)$. Dette polynomet har nullpunkt for $\theta = \frac{1}{2}\pi$ og for

$$\theta = \pm \arccos\sqrt{3/5} = \pm 39.23°,$$

og vi ser at dette er i tråd diagrammet. I figurane 2–4 er dei tilsvarande tala på nullpunkt (for $0 < \theta < \pi$) $2, 1$ og null. Desse viser difor $|Y_{3,\pm1}|$, $|Y_{3,\pm2}|$ og $|Y_{3,\pm33}|$.

Fig 1 (Y_{30}) gjev for det fyrste eit node**plan** i xy-planet, for det andre to kjegleforma nodeflater med toppvinklar bestemt av vinklane som nemnt ovanfor. Fig 2 ($Y_{3,\pm1}$) gjev to kjegleforma nodeflater. Fig 3 ($Y_{3,\pm2}$) gjev her xy-planet som eit nodeplan, og Fig 4 ($Y_{3,\pm3}$) gir inga nodeflate (men har z-aksen som ei node**linje**, om du vil).

e) Orbitalen $\psi_{2p_z} = \psi_{210}$ er antisymmetrisk med omsyn på origo (dvs mop rominversjon), og slik skal det vere. Pariteten er bestemt av vinkelfunksjonen, og pariteten til alle vinkelfunksjonar med $l = 1$ er negativ (generelt $(-1)^l$). Vi har at xy-planet er nodeplan.

På den øvre nodeflata har $2p_z$-orbitalen ψ_{210} ein konstant positiv verdi; på den nedre flata like stor og motsett verdi. Fordi bølgjefunksjonen er kontinuerleg, kan dei to flatene ikkje vere i kontakt. (Jf konturkurvene i f).

f) Smultringen har inga nodeflate. Vi ser og at orbitalen ψ_{2p_x} er gjeven ved same formel som $2p_z$-orbitalen, berre med x istadenfor z. Forma til dei to orbitalane er derfor nøyaktig den same, berre med den skilnaden at $2p_x$-orbitalen er rotasjonssymmetrisk mop x-aksen. Tilsvarande har $2p_y$-orbitalen same form med y-aksen som symmetriakse. Figuren viser $2p_x$-orbitalen