

Coulombpotentialen (väteatomen)

Tis LV7

Partikel med massa m i centralkraftspotentialen $V(r)$

Hamiltonoperator:

$$\hat{H} = \frac{\mathbf{p} \cdot \mathbf{p}}{2m} + V(r) = \frac{p_r^2}{2m} + \underbrace{V_{\text{effektiv}}(r)}_{= V(r) + \frac{L^2}{2mr^2}}$$

Rim. i radiell del (pointing to p_r^2)

banrörelsenäringsmomentet (pointing to $\frac{L^2}{2mr^2}$)

Tillståndsrum $\mathcal{H} = \{L^2\text{-fknor av läget } \mathbf{r}\}$

$$= \mathcal{H}_{\text{radiell}} \otimes \mathcal{H}_{\text{vinkel}}$$

fknor av r (pointing to $\mathcal{H}_{\text{radiell}}$)

fknor av θ, ϕ (sfäriska koord.) (pointing to $\mathcal{H}_{\text{vinkel}}$)

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2mr^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) \otimes \hat{\mathbf{I}} + \frac{L^2}{2mr^2} \otimes \hat{\mathbf{I}} + V(r) \otimes \hat{\mathbf{I}}$$

Verkar på radiell vågfkn $R(r)$ (pointing to the radial part of the equation)

förutsatt att vi vet värdet på L^2

Förra föreläs. $\rightarrow \mathcal{H}_{\text{vinkel}}$ spänns av klotytefknor

$$Y_L^m(\theta, \phi) \quad \begin{cases} L = 0, 1, 2, \dots \\ m = -L, -L+1, \dots, L-1, L \end{cases} \quad (2L+1 \text{ olika})$$

Dessa är egenfunktioner till $\hat{L}^2$ och $\hat{L}_z$

$$\begin{cases} \hat{L}^2 Y_L^m = \hbar^2 L(L+1) Y_L^m \\ \hat{L}_z Y_L^m = \hbar m Y_L^m \end{cases} \quad \text{möjliga värden på } L^2$$

Givet värdet på L har vi en (radial) Hamiltonoperator:

$$(*) \quad \hat{H}_L = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + \underbrace{\frac{\hbar^2 L(L+1)}{2mr^2}}_{\text{Veffekt } V(r)} + V(r) \quad \left\{ \begin{array}{l} \text{verkande på } \tilde{R}(r) \\ R = r^{-1} \tilde{R}(r) \end{array} \right.$$

Vad har denna operator för **spektrum** (egenvärden)?

↳ Måste lösas numeriskt. (i allmänhet)

"underbart undantag":

$$\text{om } V(r) = -\frac{k}{r}, \quad k = \text{konst.} > 0$$

Så är egenvärdesproblemet exakt lösbart!

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Coulomb pot. mellan två laddningar } q_1, q_2 \\ k = -C q_1 q_2 \end{array} \right\}$$

↑ konstanten i Coulombs lag

Förutom energi E och rörelsemängdsmoment L har rörelse i en sådan potential en ytterligare bevarad storhet:

$$e = \frac{1}{mk} \mathbf{p} \times \mathbf{L} - \frac{\mathbf{r}}{|\mathbf{r}|}$$

excentricitet

\left\{ \begin{array}{l} \text{kalla själva att} \\ \partial_t e = 0 \text{ enl. Newton II} \end{array} \right\}

Resultat (egenvärden till (*)):

Givet L så är egenvärdena av formen

$$E_n = -\frac{mk^2}{2\hbar^2 n^2} \quad \text{där } n = L+1, L+2, L+3, \dots$$

- Vanligare är att säga att alla E_n , $n=1, 2, \dots$ är möjliga men då måste L väljas som något av $L=0, 1, \dots, n-1$
- Uttrycket för energi beror alltså bara på n (ej på L)
Alla egenvärden är negativa
- Egenfunktionerna betecknas $\tilde{R}_{n,L}$ och beror på både n och L
- Det viktigaste är den för grundtillståndet $n=1, L=0$

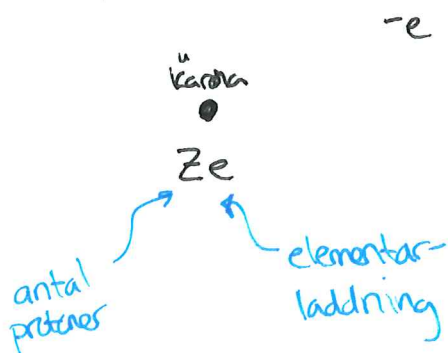
$$R_{1,0}(r) = r^{-1} \tilde{R}_{1,0}(r) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{2mk}{\hbar} \right)^{\frac{3}{2}} \exp\left(-\frac{mk}{\hbar} r\right)$$

Mer allmänt:

$$\tilde{R}_{n,L}(r) = L_{n,L}(r) \exp\left(-\frac{mk}{\hbar} r\right)$$

← generaliserat Laguerre problem

Atom spektra för en-elektronatomer (H, He^+, Li^{++})



Potential $V(r) = -\frac{k}{r}$

med $k = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0}$

Tillståndsrum $\mathcal{H} = \mathcal{H}_{\text{ban}} \otimes \mathcal{H}_{\text{spinn}}$

$$= \mathcal{H}_{\text{radiell}} \otimes \mathcal{H}_{\text{unikel}} \otimes \mathcal{H}_{\text{spinn}}$$

Energitillstånd ~~kar~~ karakteriseras av fyra kvanttal

$$\left\{ \begin{array}{ll} n = 1, 2, \dots & \text{huvudkvanttal} \\ L = 0, 1, \dots, n-1 & \text{azimutalt kvanttal} \\ m = -L, -L+1, \dots, L-1, L & \text{magnetiskt kvanttal} \\ s = \uparrow, \downarrow & \end{array} \right.$$

Energien beror bara på n :
$$E_n = - \frac{m Z^2 e^4}{32 \pi^2 \hbar^2 \epsilon_0^2} \frac{1}{n^2}$$
$$\approx \frac{Z^2}{n^2} (-13.6 \text{ eV})$$

Given n så finns det flera olika linjärt beroende tillstånd med energi E_n

Dimensionen av detta underområde är

$$\sum_{L=0}^{n-1} \sum_{m=-L}^L \underset{\substack{\uparrow \\ \text{spinn}}}{2} = 2 \sum_{L=0}^{n-1} (2L+1) = 2n \cdot \frac{1+2n-1}{2} = 2n^2 = 2, 8, \dots$$

vågfunktionens radiella del $\sim \exp(-\frac{r}{a_0})$

$$\rightarrow a_0 = \frac{4\pi\hbar^2 \epsilon_0}{m e^2} \approx 5.3 \cdot 10^{-11} \text{ m} \quad \text{Bohr-radie}$$

För $Z=1, n=1$ (väteatom i grundtillståndet)

Givet L som har att göra med banrörelsemängdsmoment
och spinnet så kan man bilda ett totalt rörelsemängds-
moment j

$$L \rightarrow j = L + \frac{1}{2} \text{ eller } j = L - \frac{1}{2}$$

Spektroskopiska beteckningar för tillstånd är nL_j
med bokstavs-kod för L enligt ovan

$$n=1 \quad L=0 \quad 1s$$

$$n=2 \quad L=0 \quad 2s$$

$$L=1 \quad 2p_{1/2}, 2p_{3/2}$$

$\vdots$

En atom kan "övergå" från ett tillstånd till ett annat
under emission/absorption av en foton med någon
energi $E = \hbar\omega$

Tillåtna övergångar $(n, L, m, s) \rightarrow (n', L', m', s')$ har

$$\left\{ \begin{array}{l} (L-L') = \pm 1 \\ m-m' = 0, \pm 1 \\ s = s' \end{array} \right. \quad \text{ty fotoner har spinn}=1$$

Rydbergs formel för ljusets våglängd λ

$$E = h\nu = \frac{2\pi hc}{\lambda}$$

$$\rightarrow \frac{1}{\lambda} = \frac{mZ^2e^4}{64\pi^3\epsilon_0^2h^3} \cdot \left| \frac{1}{n^2} - \frac{1}{n'^2} \right|$$

↑
numeriskt värde
bestämt experimentellt
på 19-talet