Mechanika kwantowa, FTiMS PG, semestr06

Zestaw 6

1. Harmoniki sferyczne zdefiniowane są w następujący sposób

$$Y_l^m(\theta,\varphi) \;=\; \epsilon\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}\,\frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}}\,e^{im\varphi}P_l^m(\cos\theta)$$

gdzie $\epsilon = (-1)^m$ dla $m \geq 0$ i $\epsilon = 1$ dla $m \leq 0$, natomiast $P_l^m(x)$ są stowarzyszonymi funkcjami Legendre'a.
Korzystając z powyższych faktów skonstruuj harmoniki sferyczne Y_0^0, Y_1^1 oraz Y_2^1, a następnie wykaż, że są one unormowane i ortogonalne.

2. Wykaż w bezpośrednim rachunku, że harmoniki sferyczne spełniają następujące relacje

   (a) $Y_l^{-l}(\theta,\varphi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi(2l)!}}e^{-il\varphi}\sin^l\theta$

   (b) $Y_l^0(\theta,\varphi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}P_l(\cos\theta)$

3. Wykaż, że funkcja

$$T(\theta) \;=\; A\ln\left(\tan\frac{\theta}{2}\right)$$

spełnia równanie biegunowe dla $l = m = 0$.
Powyższa funkcja jest formalnie poprawnym rozwiązaniem równania biegunowego. Dlaczego nie jest to rozwiązanie akceptowalne fizycznie? Uzasadnij odpowiedź.

4. Stosując metodę analityczną (rozwinięcia w szereg potęgowy) wyznacz ogólną postać funkcji falowych stanów związanych atomu wodoru i odpowiadające tym stanom poziomy energetyczne.

   Funkcja radialna (będąca rozwiązaniem równania radialnego) jest parametryzowana przez liczby n oraz l, przy czym pierwsza z nich określa numer poziomu energetycznego ($n = 1, 2, 3, \ldots$), druga jest liczbą kwantową $l = 0, 1, 2, \ldots, n-1$.
Wyznacz jawną postać rozwiązań $R_{nl}(r)$ odpowiadających stanowi podstawowemu atomu wodoru ($n = 1$) oraz pierwszemu stanowi wzbudzonemu ($n = 2$).

5. Funkcję falową elektronu w atomie wodoru w najogólniejszej postaci można zapisać jako $\Psi_{nlm} = R_{nl}(r)Y_l^m(\theta,\varphi)$. Prawdopodobieństwo *znalezienia* elektronu w objętości $dV = r^2\sin\theta dr d\theta d\varphi$ wokół punktu wyznaczonego przez współrzędne r, θ, φ jest równe $|\Psi_{nlm}(r,\theta,\varphi)|^2 dV$.
Chociaż funkcja falowa Ψ_{nlm} pozwala wyznaczyć prawdopodobieństwo znalezienia elektronu w określonym punkcie przestrzeni, to niekiedy konieczna jest znajomość prawdopodobieństwa znalezienia elektronu w określonej odległości r od jądra, niezależnie od kierunku (wyznaczonego przez kąty θ i φ).

   (a) Wykaż, że prawdopodobieństwo znalezienia elektronu pomiędzy dwiema koncentrycznymi sferami o promieniach odpowiednio r i $r + dr$ jest równe $P(r)dr = R_{nl}^2(r)r^2dr$. Funkcja $P(r)$ nazywana jest radialną funkcją gęstości prawdopodobieństwa.

   (b) Wykaż, że dla elektronu w stanie podstawowym atomu wodoru funkcja gęstości prawdopodobieństwa $P(r)$ określona jest następująco

$$P(r) \;=\; \frac{4}{a^3}r^2e^{-2r/a},$$

   gdzie $a = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{me^2} \approx 0.529\cdot 10^{-10}$m jest promieniem Bohra.
Naszkicuj wykres funkcji $P(r)$.

   (c) Korzystając z jawnej postaci funkcji $P(r)$ dla stanu podstawowego atomu wodoru wykaż, że najbardziej prawdopodobna odległość elektronu od jądra jest równa promieniowi Bohra a.

6. Funkcja falowa elektronu w atomie wodoru w stanie podstawowym ma postać

$$\Psi_{nlm}(r,\theta,\varphi) = \Psi_{100}(r,\theta,\varphi) = R_{10}(r)Y_0^0(\theta,\varphi) = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}}e^{-r/a}.$$

   Dla elektronu scharakteryzowanego powyższą funkcją proszę wyznaczyć

   (a) najbardziej prawdopodoboną odległość elektronu od jądra
   (b) średnią odległość elektronu od jądra (wartość oczekiwaną położenia r)
   (c) wariancję odległości elektronu od jądra
   (d) średnią wartość n–tej potęgi odległości elektronu od jądra (dla $n \geq -2$).

Literatura

1. R. L. Liboff, *Wstęp do mechaniki kwantowej*, rozdz. 10
2. http://mathworld.wolfram.com/LegendrePolynomial.html, http://mathworld.wolfram.com/SphericalHarmonic.html