

- c.d. atom wodoru, równanie Schrödingera, separacja na równanie radialne i dwa równania dla kątów;
- liczby kwantowe; • moment pędu; • moment magnetyczny; • spin; • atomy wieloelektronowe; • zakaz Pauliego

1. Atom wodoru. W zad. 6 z poprzedniego zestawu separacja zmiennych dla funkcji falowej elektronu $\psi(r, \vartheta, \varphi) = R(r) \cdot Y(\vartheta, \varphi)$ pozwala z równania Schrödingera uzyskać dwa równania, jedno dla części przestrzennej, zależnej tylko od r i drugie dla części kątowej zależnej od kątów ϑ i φ . Uzyskane (wszystkim się udało?!) równania są takie:

$$\frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{2mr^2}{\hbar^2} \left(E + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) R = qR, \quad \text{równanie radialne zależne tylko od } r;$$

$$\frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial Y}{\partial \vartheta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2 Y}{\partial \varphi^2} = -qY, \quad \text{część kątowa zależna od kątów } \vartheta, \varphi,$$

gdzie q jest stałą separacji. Tę stałą przedstawia się (w wyniku bardziej szczegółowych rachunków) tak: $q = l(l+1)$, gdzie l nazywana jest poboczną liczbą kwantową, przyjmującą wartości $l = 0, 1, 2, \dots$

a) Przedstawiając $Y(\vartheta, \varphi) = \Theta(\vartheta) \cdot \Phi(\varphi)$ rozseparuj równanie dla części kątowej na dwa równania, jedno dla funkcji $\Theta(\vartheta)$ i drugie dla $\Phi(\varphi)$.

b) Pokaż, że rozwiązaniem dla drugiego równania jest $\Phi(\varphi) = Ae^{im\varphi}$, i że z jednoznaczności tej funkcji falowej (okres 2π) wynika: $m = 0, \mp 1, \pm 2, \pm 3, \dots$ (m - magnetyczna liczba kwantowa).

c) Znajdź A z warunku normalizacji.

2. Funkcją własną kwadratu momentu pędu L^2 elektronu w atomie wodoru jest rozwiązanie r. Schrödingera dla części kątowej $Y(\vartheta, \varphi)$. Wiedząc, że dla pewnego stanu funkcja ta wynosi $Y_{l,m}(\vartheta, \varphi) = \sqrt{\frac{5}{16\pi}}(3 \cos^2 \vartheta - 1)$ znajdź:

a) wartość własną kwadratu momentu pędu L^2 działając operatorem \hat{L}^2 na funkcję Y : $\hat{L}^2 Y(\vartheta, \varphi) = L^2 Y(\vartheta, \varphi)$, b) wartość momentu pędu L , c) poboczną liczbę kwantową l .

Ta sama funkcja Y jest funkcją własną rzutu momentu pędu na oś z (L_z). Znajdź: d) wartość L_z , e) magnetyczną liczbę kwantową m . *Wskazówka*: patrz uzupełnienia.

3. Dla momentu pędu elektronu w stanie d sporządź rysunek możliwych ustawień wektora \vec{L} względem osi wyróżnionej osi z .

4. Czy możemy jednocześnie znać moment pędu L i jego rzut L_z na wyróżnioną oś? Czy możemy jednocześnie znać L i jego rzut L_x (lub L_y)? Objasnij. Pokaż, że możemy znać jedynie rzut L na płaszczyznę (xy) , który wynosi $L_{xy} = \sqrt{l^2 + l - m^2}$, nie znamy natomiast kąta azymutalnego φ .

5. Orbitalny moment magnetyczny atomu wodoru. Związany jest on z ruchem elektronu wokół jądra, jego związek z momentem pędu: $\vec{\mu} = -\frac{e}{2m_e} \vec{L}$. Jest on więc również skwantowany, $|\mu| = \frac{e\hbar}{2m_e} \sqrt{l(l+1)}$, podobnie skwantowana jest z -owa składowa, $\mu_z = \frac{e\hbar}{2m_e} m$.

Wielkość $\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e} = 9.3 \cdot 10^{-24}$ J/T nazywana jest magnetonem Bohra.

Atom wodoru umieszczony jest w silnym zewnętrznym polu magnetycznym $B = 0.8$ T. a) Na ile podpoziomów rozszczepia się poziom energetyczny atomu dla danych liczb kwantowych n i l w wyniku oddziaływania momentu magnetycznego $\vec{\mu}$ z polem \vec{B} (zjawisko Zeemana). b) Oblicz odstęp między podpoziomami (w eV). *Wskazówka*: Przypomnij sobie wzór z elektrodynamiki na energię potencjalną układu o momencie dipolowym μ umieszczonym w polu magnetycznym, $\Delta E = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}$.

6. Spinowy moment pędu elektronu i spinowy moment magnetyczny: objasnij. Składanie momentów pędu: objasnij.

7. Uzasadnij, że moment magnetyczny atomu wodoru w stanie podstawowym wynosi $\sqrt{3} \mu_B$.

8. Wyznaczyć wartości orbitalnego, spinowego i całkowitego momentu pędu dla elektronu $3d$.

9. Atomy wieloelektronowe, zakaz Pauliego. Znaleźć maksymalną liczbę elektronów mających w atomie jednakowe liczby kwantowe n i l .

10. Znaleźć liczbę elektronów w atomach, w których zapełnione są: a) powłoki K i L , podpowłoka $3s$ i podpowłoka $3p$ do połowy, b) powłoki K, L, M , podpowłoki $4s, 4p, 4d$. Co to za atomy?