

Harjoitustyö 3

Johdanto on pitkänpuoleinen, mutta tehtävänannossa annetaan tarvittavien yhtälöiden numerot.

Johdanto

Osa 1

Vetyatomi koostuu protonista ja elektronista. Niillä on erimerkkinen sähkövaraus, joten ne vetävät toisiaan puoleensa. Klassisessa fysiikassa systeemin dynamiikka voidaan johtaa *Hamiltonin funktiosta*

$$H = \frac{p_1^2}{2m_1} + \frac{p_2^2}{2m_2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \quad (1)$$

missä $\mathbf{p}_i$, $\mathbf{r}_i$ ja m_i ovat protonin ja elektronin liikemäärä, paikka ja massa. Termi $p_i^2/2m$ kuvaa kineettistä energiaa ja

$$V = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \quad (2)$$

on sähköiseen vuorovaikutukseen liittyvä *Coulombin potentiaalienergia* (ϵ_0 on tyhjiön permittiivisyys). Yleisesti potentiaalienergian nollataso voidaan valita miten halutaan. Tässä on valittu $V(\infty) = 0$. Jotta elektroni ei karkaisi protonilta, on sen energian oltava *negatiivinen*.

Kvanttimekaniikassa paikka ja liikemäärä korvataan *operaattoreilla*, muodostetaan *Hamiltonin operaattori*, jonka *ominaisfunktiot* kuvaavat elektronin ja protonin *todennäköisyysjakamaa* avaruudessa. Kvanttimekaniikassa siis luovutaan pistemäisen hiukkasen käsitteestä ja tilalle tulee aineaalto. Hamiltonin operaattorin ominaisarvoyhtälö, eli *Schrödingerin yhtälö* on

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_1^2\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) - \frac{\hbar^2}{2m}\nabla_2^2\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = E_t\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \quad (3)$$

missä ∇_i tarkoittaa gradienttia $\mathbf{r}_i$:n suhteen. Tästä voidaan erottaa *massakeskipisteen* liike ja elektronin ja protonin suhteellinen liike. Massakeskipiste liikkuu vakionopeudella ja suhteelliselle liikkeelle saadaan

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\mathbf{r}) - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}) \quad (4)$$

missä $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$ ja $E = E_t - E_c$, missä E_c on massakeskipisteen liikkeen energia.

Lähdetään ratkaisemaan yhtälöä (4). Siirrytään *luonnolliseen yksikköjärjestelmään*, jolloin päästään eroon ylimääräisistä vakioista:

$$r \rightarrow a_0 r \quad (5)$$

$$E \rightarrow \frac{\hbar^2}{2ma_0^2} E \quad (6)$$

ja valitaan

$$a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{me^2} \quad (7)$$

joka on *Bohrin atomimallin* ennustama vetyatomin alimman tilan säde. Yo. kaavan voi johtaa ympyräliikkeen likeyhtälöstä olettamalla, että radan säde voi olla vain hiukkasen *DeBroglien aineaallon* aallonpituuden monikerta. Energian yksiköksi saadaan *Rydberg*

$$\frac{m}{2\hbar^2} \frac{e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2} \equiv 1 \text{ Ryd} \quad (8)$$

ja Schrödingerin yhtälöksi saadaan

$$\nabla^2 \psi(\mathbf{r}) + \left(\frac{2}{r} + E \right) \psi(\mathbf{r}) = 0 \quad (9)$$

Tehdään seuraavaksi *muuttujien erottelu*: Merkitään $\psi(\mathbf{r}) = u(r)w(\phi, \theta)$, missä r , ϕ ja θ ovat pallokoordinaatiston muuttujia. Kun tämä sijoitetaan yhtälöön (9), saadaan kaksi riippumatonta yhtälöä u :lle ja w :lle. u on aaltofunktion *radiaaliosa* ja w *kulmaosa*. Merkitään $u(r) = y(r)/r$, jolloin funktiolle y saadaan yksinkertainen yhtälö

$$y''(r) + \left(E + \frac{2}{r} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) y(r) = 0 \quad (10)$$

missä l on *kulmaluokemäärään* liittyvä *kvanttiluku*.

Osa 2

Johdetaan funktiolle y *reunaehdot*: Suurilla r :n arvoilla termit $2/r$ ja $l(l+1)/r^2$ ovat pieniä, ja jää

$$y''(r) + Ey(r) = 0 \quad (11)$$

jonka ratkaisu on

$$y(r) \sim e^{-\sqrt{-E}r}, \quad r \rightarrow \infty \quad (12)$$

Pienillä r :n arvoilla dominoiva termi on taas $l(l+1)/r^2$, eli

$$y''(r) - \frac{l(l+1)}{r^2} y(r) = 0 \quad (13)$$

eli

$$y(r) \sim r^{l+1}, \quad r \rightarrow 0 \quad (14)$$

Rajoitutaan tässä kuitenkin *pallosymmetrisiin* ominaisfunktioihin, joille $l = 0$, mistä seuraa että $w(\phi, \theta) = 1$, ts. aaltofunktio on kokonaisuudessaan $\psi(\mathbf{r}) = u(r) = y(r)/r$.

Ratkaistava yhtälö on siis

$$y''(r) + \left(E + \frac{2}{r}\right) y(r) = 0 \quad (15)$$

yllä mainituilla reunaehdoilla (12) ja (14) (sillä muutoksella että $l = 0$). Reunaehdot määräävät siis funktion y *asymptoottisen käyttäytymisen* origossa ja äärettömyydessä. Huom. probleemassa on siis kaksi tuntematonta: aaltofunktio y ja ominaisarvo E . Tämä voidaan ratkaista analyyttisesti: ominaisarvot ovat muotoa

$$E_n = -\frac{1}{n^2}, \quad n = 1, 2, \dots \quad (16)$$

ja ratkaisufunktiot voidaan esittää ns. Laguerren polynomien avulla.

Johdatus tehtävänantoon

Tässä harjoitustyössä tehtäväsi on ratkaista yhtälö (15) numeerisesti. Sinun on siis löydettävä ominaisarvot E sekä vastaavat ominaisfunktiot y . E :n arvo on käytännössä arvattava ja sitten testattava, onko arvatulle E :n arvolle olemassa ratkaisufunktiota y . Huom. y :n on toteutettava yhtälö (15) kaikilla r :n arvoilla, joten sen on oltava *jatkuva ja derivoituva*.

Seuraten luennoissa esitettyä menetelmää, aseta tarkasteltavan alueen rajat r_0 ja r_∞ . Jaa alue kahteen osaan, $I_0 = [r_0, r_i]$ ja $I_\infty = [r_i, r_\infty]$, ja ratkaise yhtälö erikseen kummassakin. Alueessa I_0 sovelta reunaehtoa (14) ja alueessa I_∞ reunaehtoa (12), ts. funktion y ja sen derivaatan arvot pisteissä r_0 ja r_∞ määräytyvät näistä reunaehdoista.

Sovita eri alueista saadut ratkaisufunktiot yhteen pisteessä r_i . Funktion ja sen derivaatan on oltava jatkuvia, ts.

$$\frac{y'_0(r_i)}{y_0(r_i)} = \frac{y'_\infty(r_i)}{y_\infty(r_i)}$$

Jos y toteuttaa tämän ehdon, se kelpaa ratkaisuksi, ja vastaava E :n arvo on yhtälön ominaisarvo.

Kun ominaisarvo on löytynyt, laske aaltofunktio $u(r) = y(r)/r$ ja normita se luennoissa esitetyllä tavalla.

Tehtävänanto

1. Etsi vetyatomin *neljä alinta energiatilaa*. Määritä energian arvot (probleeman ominaisarvot) sekä vastaavat aaltofunktiot. Normita aaltofunktiot ja piirrä niiden kuvaajat. Älä käytä hyväksesi yhtälöä (16), vaan kirjoita jonkinlainen ominaisarvojen etsintäalgoritmi. Huom. etsintäalgoritmissi saattaa löytää myös epäjatkuvuuskohdan! Ratkaisussa voit käyttää Mathematican valmista funktiota `NDSolve`.
2. Kun vetyatomin elektroni siirtyy korkeammalta tilalta matalammalle, se emittoi fotonin, jonka aallonpituus on

$$\lambda = \frac{hc}{\Delta E} \quad (17)$$

missä ΔE on energiatasojen erotus, c on valon nopeus ja h Planckin vakio. Laske edellisessä tehtävässä saamistasi energian arvoista emittoituvien fotonien aallonpituudet, kun elektroni siirtyy alimalle tilalle kolmelta ensimmäiseltä viritystilalta, ts. laske siirtymiä $2 \rightarrow 1$, $3 \rightarrow 1$ ja $4 \rightarrow 1$ vastaavat aallonpituudet.

Ohjeita toteutukseen

- Energian arvojen etsintää ei tarvitse aloittaa kovin kaukaa nollostakaan. Esim. energia -3 Ryd vastaisi klassisesti kiertoradan sädettä $0.1 \cdot 10^{-11} \text{ m}$, joka on jo melko pieni.
- Kun tilan energia kasvaa, elektronin aaltofunktio ulottuu kauemmaksi protonista. Tämän vuoksi parametria r_∞ on kasvatettava kun etsit korkeamman energian tiloja.
- Käytännön ohjeet ovat samat kuin 1. ja 2. harjoitustyössä.