

Øving 5

1) Hamilton-operatoren for en partikkel med masse m på en sfære med radius r_0 kan skrives

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2mr_0^2} \hat{\Lambda}^2$$

der

$$\hat{\Lambda}^2 = \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta}$$

er en operator kalt legendrianen.

a) Løsningene $\psi_{lm_l}(\theta, \phi)$ til Schrödinger-likningen er de sfærisk harmoniske $Y_{lm_l}(\theta, \phi)$. Disse kan plottes ved hjelp av codecellen under.

Hva er tillatte verdier for m og l ? For en gitt l hva er degenerasjonen i energien?

In [1]:

```
%matplotlib inline
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
from scipy.special import sph_harm
from mpl_toolkits.mplot3d import Axes3D
from matplotlib import cm

m=0
l=2
limit = .5

theta_1d = np.linspace(0, np.pi, 91)
phi_1d = np.linspace(0, 2*np.pi, 181)

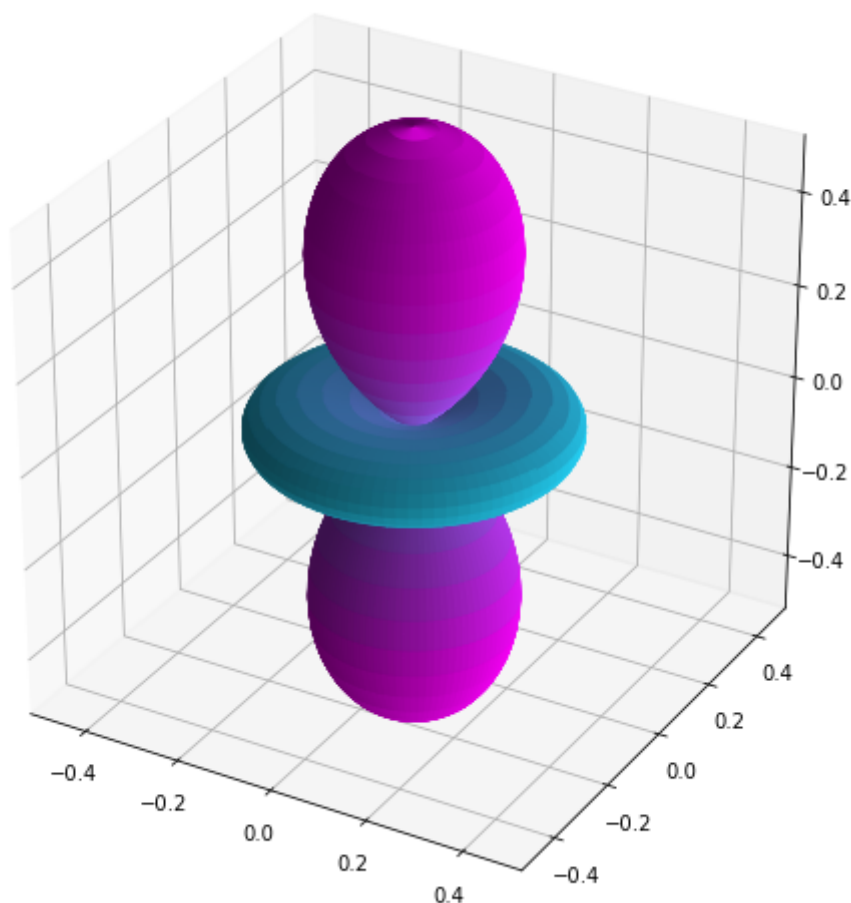
theta_2d, phi_2d = np.meshgrid(theta_1d, phi_1d)
xyz_2d = np.array([np.sin(theta_2d) * np.sin(phi_2d),
                  np.sin(theta_2d) * np.cos(phi_2d),
                  np.cos(theta_2d)])

colormap = cm.ScalarMappable( cmap=plt.get_cmap("cool"))
colormap.set_clim(-.45, .45)

plt.figure(figsize=(9,9))
ax = plt.gca(projection = "3d")

Y_lm = sph_harm(m,l, phi_2d, theta_2d)
r = np.abs(Y_lm.real)*xyz_2d
ax.plot_surface(r[0], r[1], r[2],
               facecolors=colormap.to_rgba(Y_lm.real),
               rstride=2, cstride=2)
ax.set_xlim(-limit,limit)
ax.set_ylim(-limit,limit)
ax.set_zlim(-limit,limit)
#ax.set_axis_off()

plt.show()
```



l: Alle positive heltall og 0

m: Alle tall fra -l til +l

For en l er antall degenerasjoner gitt ved $2l+1$

b) Bekreft at:

$$Y_{11}(\theta, \phi) = -\frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{2\pi}} \sin \theta e^{i\phi}$$

er en løsning av Schrödinger-likningen og finn energien E_{11} .

Setter inn i S.L., det er en løsning dersom:

$$\hat{H}Y_{11}(\theta, \phi) = E_{11}Y_{11}(\theta, \phi)$$

Sjekker ved å bruke hamiltonoperatoren definert øverst i oppgaven:

$$\begin{aligned}\hat{H}Y_{11}(\theta, \phi) &= -\frac{\hbar^2}{2mr_0^2} \hat{\Lambda}^2 - \frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{2\pi}} \sin \theta e^{i\phi} \\ &= \frac{\hbar^2}{2mr_0^2} \frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{2\pi}} \hat{\Lambda}^2 \sin \theta e^{i\phi}\end{aligned}$$

Mellomregning, sjekker resultatet når legendrianen virker på den variable delen av bølgefunksjonen:

$$\begin{aligned}&\hat{\Lambda}^2 \sin \theta e^{i\phi} \\ &= \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \sin \theta e^{i\phi} + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta e^{i\phi} \\ &= \frac{1}{\sin^2 \theta} \sin \theta \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} e^{i\phi} + e^{i\phi} \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \\ &= -\frac{1}{\sin \theta} e^{i\phi} + e^{i\phi} \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \cos \theta \\ &= -\frac{1}{\sin \theta} e^{i\phi} + e^{i\phi} \frac{1}{\sin \theta} (\cos^2 \theta - \sin^2 \theta) \\ &= \frac{1}{\sin \theta} e^{i\phi} (\cos^2 \theta - \sin^2 \theta - 1) \\ &= \frac{1}{\sin \theta} e^{i\phi} (\cos^2 \theta - \sin^2 \theta - \cos^2 \theta - \sin^2 \theta) \\ &= \frac{1}{\sin \theta} e^{i\phi} (-2 \sin^2 \theta) \\ &= -2e^{i\phi} \sin \theta\end{aligned}$$

Bruker resultatet fra mellomregningen videre i sjekken for egenfunksjonen, fortsetter der vi slapp:

$$\begin{aligned}&\frac{\hbar^2}{2mr_0^2} \frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{2\pi}} \hat{\Lambda}^2 \sin \theta e^{i\phi} \\ &= \frac{\hbar^2}{2mr_0^2} \frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{2\pi}} (-2e^{i\phi} \sin \theta) \\ &= \frac{2\hbar^2}{2mr_0^2} \left(-\frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{2\pi}} \sin \theta e^{i\phi} \right) \\ &= \frac{\hbar^2}{mr_0^2} Y_{11}(\theta, \phi)\end{aligned}$$

Dermed er det vist at $Y_{11}(\theta, \phi)$ er en løsning av S.L., tilhørende uttrykk for energien/egenverdien er gitt ved:

$$E_{11} = \frac{\hbar^2}{mr_0^2}$$

c) Operatoren for det totale vinkelmoment og dets z -komponent kan skrives $\hat{L}^2 = -\hbar^2 \hat{\Lambda}^2$ og $\hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi}$. Finn verdien av L^2 og L_z for en partikkel i tilstanden $Y_{11}(\theta, \phi)$ ved å bekrefte at tilstanden er en egenfunksjon av $\hat{L}^2$ og $\hat{L}_z$.

Sjekker på lik måte som i b):

$$\hat{L}^2 Y_{11}(\theta, \phi) = -\hbar^2 \hat{L}^2 Y_{11}(\theta, \phi)$$

Resultatet av legendrianen på $Y_{11}(\theta, \phi)$ ble i oppgave b) vist at var: $2Y_{11}(\theta, \phi)$ (med noe ekstra regning ettersom konstantdelen ikke ble med på selve stykket). Dermed får vi:

$$= -2\hbar^2 Y_{11}(\theta, \phi)$$

Vi får som resultat at $Y_{11}(\theta, \phi)$ er en egenfunksjon til $\hat{L}^2$ ettersom vi får ut egenverdien $-2\hbar^2$

Sjekker L_z :

$$\begin{aligned} \hat{L}_z Y_{11}(\theta, \phi) &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi} Y_{11}(\theta, \phi) \\ &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi} \left(-\frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{2\pi}} \sin \theta e^{i\phi} \right) \\ &= -i\hbar i \left(-\frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{2\pi}} \sin \theta e^{i\phi} \right) \\ &= \hbar Y_{11}(\theta, \phi) \end{aligned}$$

Får dermed at $Y_{11}(\theta, \phi)$ er en egenfunksjon til $\hat{L}_z$ ettersom vi får egenverdien $\hbar$

d) Siden komponentene til vinkelmomentet ikke kommuterer er det, for en partikkel i tilstanden $Y_{11}(\theta, \phi)$, usikkerhet i hva L_x og L_y er. Basert på svarene i b), tegn de tillatte retningene for $\mathbf{L}$ og forklar at dette gir en kjegle.

Jeg velger å sløyfe tegningen i denne oppgaven, for jeg får ikke jupyter til å akseptere bilder når jeg prøver å laste dem opp.

Vi vet at egenverdien til $\hat{L}^2$ er $2\hbar^2$. Hver av komponentene kommuterer ikke med hverandre, og det er ikke mulig å si noe om dem i forhold til hverandre. Komponentene kommuterer derimot med $\hat{L}^2$, slik at vi kan velge en komponent vi kan si noe om. Dersom vi velger $\hat{L}_z$, gjenstår altså $\hat{L}_x$ og $\hat{L}_y$. Fra c) vet vi at egenverdien til $\hat{L}_z$ er $\hbar$. Ettersom $\hat{L}$ er en vektor med x-, y- og z-komponenter, kan vi skrive:

$$\hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2$$

Ved å sette inn egenverdiene fra c) får vi:

$$\begin{aligned} \hat{L}^2 &= \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hbar^2 = 2\hbar^2 \\ \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 &= \hbar^2 \end{aligned}$$

Dette er likt en sirkellikning. Altså vil formen på objektet være sirkulært. Ettersom $\hat{L}^2$ er gitt på samme måte som ei kule, vil lengden av diagonalen i kjegla være gitt ved $2\hbar^2$ i tilstanden $Y_{11}(\theta, \phi)$. Videre er egenverdien til z-komponenten gitt. Den gir projeksjonen av kjegla på z-aksen, slik at vinkelen på sidekanten fra z-aksen kan bestemmes ved å se på forholdet mellom projeksjonen og lengden på diagonalen av kjegla.

2) Bølgefunksjonene som løser Schrödinger-likningen for hydrogenatomet kan skrives:

$$\psi_{nlm_l}(r, \theta, \phi) = R_{nl}(r) Y_{lm_l}(\theta, \phi),$$

der $R_{nl}(r)$ kalles den radielle bølgefunksjonen og $Y_{lm_l}(\theta, \phi)$ er en sfærisk harmonisk.

a) Hva kalles kvantetallene n , l , og m_l , og hvilken informasjon gir de om et hydrogenatom beskrevet av orbitalen $\psi_{nlm_l}(r, \theta, \phi)$? Vi referer ofte til orbitaler med navn som $1s$, $2s$, $2p$, $3p$, $3d$, etc. Forklar sammenhengen mellom disse navnene og kvantetallene n og l .

n kalles hovedkvantetallet, det forteller hvilken energitilstand et elektron på hydrogenatomet befinner seg i. (Det bestemmer også energien). n kan ha verdier som er positive heltall: $1, 2, \dots$

l kalles orbitalvinkelmomentkvantetallet, det definerer $\mathbf{L}^2$, totalt angulært moment. l kan ha verdier fra 0 til $n-1$

m_l kalles det magnetiske kvantetallet, det angir retningen på det angulære momentet. m_l kan ha verdier fra $-l$ til $+l$.

Tallet som står først i orbitalen er n , bokstaven bak tallet angis av l , hvor bokstavene bestemmes slik: $s: l=0$, $p: l=1$, $d: l=2$ Altså står for eksempel $3d$ for kvantetallene $n=3$ og $l=2$

b) Ved hjelp av python finn r_0 slik at sannsynligheten for å finne elektronet ved en avstand $r \leq r_0$ er: 25%, 50%, 80%, 90%, 95%.

Bruk formelen for Bohr-radien, $a = 4\pi\epsilon_0\hbar^2/\mu e^2$, der e er elementærladningen og μ er topartikkelsystemets reduserte masse, til å bestemme r_0 i meter og Ångstrøm. For å løse oppgaven kan numpy funksjonen `trapez` benyttes, og r verdier kan gjettes eller en `while` loop kan benyttes.

Bølgefunksjonen er gitt ved en angulær del og en radiell del. Det antas at bølgefunksjonen er normert, dermed blir integralet over den angulære delen = 1 ettersom dersom man sjekker Borns fortolkning, kan radiell og angulær del splittes i to integral som ganges sammen. Da må integralet over angulær del være 1, hvilket også gjelder i denne oppgaven. Dermed trenger vi kun å se på radiell del $R(r)$.

In [90]:

```

import numpy as np
from scipy.integrate import quad

#radius_list er en tom liste der r0 verdiene, i ångstrøm, for de ulike sannsynlighetene
skal lagres,
#der første element i listen er for 25%, andre element i listen er for 50% osv.
radius_list = [0] * 5
probability_list = [0.25,0.50,0.80,0.90,0.95]

Bohrradius = 0.52918 #Beregnet på papir

testradiuser = np.arange(0,20, 0.01)

def Radius(r,a=Bohrradius):
    return (2/(a**(3/2)))*r*np.exp(-r/a)

def Radiussquared(r,a=Bohrradius):
    return ((2/(a**(3/2)))*r*np.exp(-r/a))**2

def Probability(r):
    return quad(Radius,0,r)

def find_radiuses(liste):
    for sannsynlighet in liste:
        forskjell = 3
        for radius in testradiuser:
            diff = abs(sannsynlighet - Probability(radius)[0])
            if forskjell>diff:
                forskjell = diff
                beste_radius = radius
        radius_list[liste.index(sannsynlighet)] = beste_radius

    return None

find_radiuses(probability_list)

meterradiuser = np.array(radius_list)*10**(-10)

def Niceprint():
    for index in range(len(probability_list)):
        print(f'For sannsynligheten {probability_list[index]} er radiusen {radius_list[
index]:.2f}Å og {meterradiuser[index]:.2e}m')
    return None
Niceprint()

```

For sannsynligheten 0.25 er radiusen 0.46Å og 4.60e-11m
 For sannsynligheten 0.5 er radiusen 0.71Å og 7.10e-11m
 For sannsynligheten 0.8 er radiusen 1.13Å og 1.13e-10m
 For sannsynligheten 0.9 er radiusen 1.41Å og 1.41e-10m
 For sannsynligheten 0.95 er radiusen 1.67Å og 1.67e-10m

In []:

c Energien til et hydrogenatom er gitt ved

$$E_n = -\left(\frac{\mu e^4}{32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2}\right) \frac{1}{n^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

Finn frekvensen ν et foton må ha for å eksitere hydrogenatomet fra en $1s$ -orbital til en $2p$ -orbital, ved hjelp av python. Hva er bølgelengden λ til fotonet? I hvilken strålingskategori (infrarød, synlig, uv, \ldots) er fotonet? Du kan bruke at $E = h \nu$.

In [92]:

```
# Frekvensen skal lagres i variablen freq (enhet Hz) og bølgelengden (enhet m) lagres i
variablen wavelength

#Ser her at det er brukt mu i telleren. I litteraturen er denne oppgitt som m_e. Antar
derfor at dette er rett ettersom
#jeg ikke vet hva den skal være ellers.

#Beregner så første del av uttrykket ettersom dette er konstant.
import numpy as np

Konstantdel_energi = - ((9.1093897*10**(-31) * (1.60217653*10**(-19))**4) / (32*np.pi**
2 * (8.854187817*10**(-12))**2 * (1.05457148*10**(-34))**2))
#Gjør om fra joule til eV

Konstantenergi = Konstantdel_energi/(1.602*10**(-19))

def Delta_E(n0, n1):
    Delta = Konstantenergi* (1/(n1**2) - 1/(n0**2) )
    return Delta

def find_v(n0, n1):
    Delta_Energy = Delta_E(1, 2)
    v = Delta_Energy/(4.1357*10**(-15))
    return v

def find_wavelength(n0, n1):
    return (3*10**8 / find_v(n0, n1))/10**(-9)

freq = find_v(1, 2)
wavelength = find_wavelength(1, 2)

print(f'Frekvensen er {freq:.2e}Hz og bølgelengden er {wavelength:.2f}nm, dette er er U
V-lys')
```

Frekvensen er 2.47e+15Hz og bølgelengden er 121.57nm, dette er er UV-lys

In []: