

Vzbujena stanja vodikovega atoma z $j = 1/2$

Gal Matijević

• Poišči prva vzbujena stanja vodikovega atoma s kvantnim številom skupne vrtilne količine elektrona $j = 1/2$. Kolikšna je pričakovana vrednost razdalje elektrona od jedra za vsako od teh stanj?

Najprej se spomnimo, kako lahko podrobno določimo stanje vodikovega atoma. Za to potrebujemo štiri kvantna števila, glavno kvantno število n , število velikosti obhodne vrtilne količine l , število komponente te količine m_l in število komponente spinske vrtilne količine m_s . Stanje lahko v enostavni obliki zapišemo kot

$$|n, l, m_l, m_s\rangle.$$

Valovno funkcijo, ki opisuje zgornje stanje, s separacijo spremenljivk razdelimo na krajevi, kotni in spinski del,

$$\psi = R_{nl} Y_{lm_l} \chi_{m_s}.$$

Opazimo, da je krajevni del odvisen samo od dveh kvantnih števil, n in l .

Sedaj se lahko lotimo naloge. Število $n = 1$ opisuje osnovno stanje atoma, zato bodo nas zanimala vsa stanja, določena z $n = 2$. Z danimi števili l in s lahko sestavimo vsa števila polne vrtilne količine j , ki zadoščajo enačbi

$$l - s \leq j \leq l + s.$$

Torej, če upoštevamo, da ima elektron spin $1/2$ in da nas zanimajo le stanja z $j = 1/2$, ugotovimo, da sta ustrezni le dve kvantni števili l

$$\begin{aligned} l &= j - s = 0 \\ l &= j + s = 1, \end{aligned}$$

saj število j ne more biti negativno.

Za obe stanji, ki smo ju našli, lahko izračunamo pričakovano vrednost razdalje od jedra. Poznati moramo še radialno verjetnostno gostoto, ki je določena kot

$$r^2 R_{nl}^2,$$

r^2 pred funkcijo pride od normalizacije radialne funkcije. Pričakovana vrednost za prvo stanje z $l = 0$ je enaka

$$\begin{aligned}\langle 2\ 0|r|2\ 0\rangle &= \int_0^\infty r^3 R_{20}^2 dr \\ &= \int_0^\infty r^3 \left(2(2r_B)^{-3/2} \left(1 - \frac{r}{2r_B}\right) e^{-r/2r_B}\right)^2 dr \\ &= 6r_B,\end{aligned}\tag{1}$$

kjer je

$$r_B = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{e_0^2 m} = 0.0528nm$$

Bohrov radij.

Obliko funkcij R_{nl} najdemo v kakšni knjigi. Integral lahko rešimo na več bolj ali manj mučnih načinov. Lahko pa si že od začetka pomagamo s prikladno formulo, ki neposredno povezuje pričakovano vrednost in kvantni števili,

$$\langle r \rangle_{nl} = \frac{1}{2}r_B(3n^2 - l(l+1)).$$

Ta formula sledi iz rekurzijske relacije za pridružene Laguerreove polinome, ki nastopajo v radialnih funkcijah. Z zgornjo formulo lahko prav hitro izračunamo še pričakovano vrednost oddaljenosti drugega stanja. Enaka je

$$\langle r \rangle_{21} = 5r_B.$$

• **Naj bo kvantno število komponente celotne vrtilne količine enako $m_j = 1/2$. Kolikšna je verjetnost, da se elektron nahaja v stanju z $m_s = 1/2$?**

Na začetku smo omenili, da lahko vodikov atom opišemo s stanjem, predstavljenim s štirimi kvantnimi števili n, l, m_l, m_s . Vendar to ni edina ustrezna četverica. Če poznamo celotno vrtilno količino, je prav tako dobra baza za opis tudi

$$|n, l, j, m_j\rangle.$$

Glede na to, da je naša naloga pri danem m_j poiskati verjetnost, da je delec v določenem stanju m_s , moramo stanje, zapisano v drugi (j) bazi, razviti po prvi (s) bazi. Stanji imata v obeh bazah enako število n , zato ga izpustimo.

$$|j, m_j, l\rangle = C_1|l, m_l = m_j - 1/2\rangle|\uparrow\rangle + C_2|l, m_l = m_j + 1/2\rangle|\downarrow\rangle$$

Razvoj potrebuje malce komentarja. Celotna količina je sestavljena iz tirne in spinske. Produktno stanje na desni v prvem primeru predstavlja spin $+1/2$ in za $1/2$ manjšo celotno komponento količine, drugo pa ravno obratno, saj je le tako celotna količina ohranjena.

Razvijmo obe stanji!

$$|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0\rangle = C_1|0, 0\rangle|\uparrow\rangle + C_2|0, 1\rangle|\downarrow\rangle$$

$$|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 1\rangle = C_1|1, 0\rangle|\uparrow\rangle + C_2|1, 1\rangle|\downarrow\rangle$$

Koeficienta razvoja C_1 in C_2 se imenujeta *Clebsch-Gordanova* koeficienta. Konstanta C_2 v razvoju prvega stanja mora biti enaka 0, saj bi sicer obstajalo stanje, ki ima kvantno število obhodne vrtilne količine večje kot število njeno komponento. Torej ostanemo samo s stanjem $m_l = 0$ in $m_s = 1/2$ in je verjetnost za to stanje kar 1. Druge možnosti ni.

Sedaj pa pogledjmo, kako poiščemo koeficiente v ustreznih tabelah za razvoj naslednjega stanja. Pomagajmo si z naslednjo tabelo. Veliki številki

$1 \times 1/2$		3/2					
		+3/2					
+1 +1/2		1		3/2 1/2			
		1/2	1/2				
1 -1/2		1/3 2/3				3/2 1/2	
		0 1/2		2/3 -1/3		-1/2 -1/2	
0 -1/2		2/3 1/3		3/2			
		0 1/2		1/3 -2/3		3/2	
		-1		-1/2		1	

Slika 1: Tabela *Clebsch-Gordanovih* koeficientov

$1 \times 1/2$ predstavljata tirno in spinsko vrtilno količino. Zgornje številke v zgornjih pravokotnih predstavljajo celotno vrtilno količino (J), spodnje pa njeno komponento (M). Številke v srednjih pravokotnikih so koreni koeficientov, v spodnjih pravokotnikih pa najdemo m_l in m_s .

V tabeli poiščemo stolpec $(1/2, 1/2)$, kar ustreza našemu primeru. Produktno stanje za koeficientom C_1 je sestavljeno iz $m_l = 0$ in $m_s = 1/2$, torej je ustrezeni koeficient enak $-1/3$. Drugo produktno stanje je sestavljeno iz

$m_l = 1$ in $m_s = -1/2$, kar da koeficient $\sqrt{2/3}$. Razvoj našega stanja se tako glasi

$$|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 1\rangle = -\sqrt{\frac{1}{3}}|1, 0\rangle|\uparrow\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}}|1, 1\rangle|\downarrow\rangle.$$

Verjetnost, da bo imel elektron spin $1/2$ je kar kvadrat prvega koeficienta, torej $1/3$.