Μεθοδικά, απλά & κατανοητά...

Θέμα

Υδρογονοειδές ιόν $Z = 4$ βρίσκεται στην κατάσταση

$$\psi = A\left(\psi_{200} + e^{i\omega}\psi_{100}\right)$$

όπου ω σταθερά με $\omega \in [0, 2\pi)$. Εργαζόμενοι στο ατομικό σύστημα μονάδων και ως συνάρτηση του ω:
(α) Υπολογίστε τον συντελεστή κανονικοποίησης.
(β) Υπολογίστε τη μέση τιμή της ενέργειας.
(γ) Υπολογίστε τη μέση τιμή και την αβεβαιότητα της r.

α) Συνθήκη κανονικοποίησης: $\sum |c_{nlm}|^2 = 1 \rightarrow |A|^2 + |Ae^{i\omega}|^2 = 1 \rightarrow$

$\rightarrow |A|^2 + |A|^2 e^{-i\omega} e^{i\omega} = 1 \rightarrow 2|A|^2 = 1 \rightarrow |A|^2 = \frac{1}{2} \rightarrow \boxed{A = \frac{1}{\sqrt{2}}}$

Δηλαδή: $\psi = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\psi_{200} + e^{i\omega}\psi_{100}\right)$ (1)

β) Η μέση τιμή της ενέργειας είναι:

$\langle E \rangle = \sum |c_{nlm}|^2 E_n = \left|\frac{1}{\sqrt{2}}\right|^2 E_2 + \left|\frac{e^{i\omega}}{\sqrt{2}}\right|^2 E_1 = \frac{1}{2}E_2 + \frac{1}{2}E_1$ (2)

όπου $E_n = -\frac{Z^2}{2n^2} \xrightarrow{Z=4} E_n = -\frac{16}{2n^2} \rightarrow E_n = -\frac{8}{n^2}$ $n = 1, 2, \dots$

οπότε: $E_1 = -8$ και $E_2 = -2$

Άρα η (2) δίνει: $\langle E \rangle = \frac{1}{2}(-2) + \frac{1}{2}(-8) = -1 - 4 \rightarrow \boxed{\langle E \rangle = -5\,AU}$

γ) Η μέση τιμή της θέσης r είναι:

$\langle r \rangle = (\psi, r\psi) \overset{(1)}{=} \frac{1}{\sqrt{2}}\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\psi_{200} + e^{i\omega}\psi_{100}, r\psi_{200} + re^{i\omega}\psi_{100}\right) =$

$= \frac{1}{2}\left(R_{20}Y_0^0 + e^{i\omega}R_{10}Y_0^0, rR_{20}Y_0^0 + re^{i\omega}R_{10}Y_0^0\right)$

Λόγω ορθοκανονικότητας των Y_l^m είναι $\int Y_0^{0*} Y_0^0 \, d\Omega = 1$ οπότε:

$$\langle r\rangle = \frac{1}{2}\left[(R_{20}, rR_{20}) + (R_{20}, re^{i\omega}R_{10}) + (e^{i\omega}R_{10}, rR_{20}) + (e^{i\omega}R_{10}, re^{i\omega}R_{10})\right] =$$

−14−

$$= \frac{1}{2}\left[(R_{20}, rR_{20}) + e^{i\omega}(R_{20}, rR_{10}) + e^{-i\omega}(R_{10}, rR_{20}) + \cancel{e^{-i\omega}e^{i\omega}}(R_{10}, rR_{10})\right] =$$

$$= \frac{1}{2}\left[(R_{20}, rR_{20}) + (e^{i\omega} + e^{-i\omega})(R_{20}, rR_{10}) + (R_{10}, rR_{10})\right] \quad (3)$$

όπου λάβαμε υπόψη ότι $(R_{20}, rR_{10}) = (R_{10}, rR_{20})$.

Αλλά: $\cos\omega = \dfrac{e^{i\omega} + e^{-i\omega}}{2} \to e^{i\omega} + e^{-i\omega} = 2\cos\omega$ οπότε η (3) γίνεται:

$$\langle r\rangle = \frac{1}{2}\left[(R_{20}, rR_{20}) + 2\cos\omega\,(R_{20}, rR_{10}) + (R_{10}, rR_{10})\right] \quad (4)$$

όπου • $(R_{20}, rR_{20}) = \int_0^\infty R_{20}^* \, r R_{20} \, r^2 dr = \int_0^\infty |R_{20}|^2 r^3 dr$

με $R_{20} = 2\left(\frac{4}{2}\right)^{3/2}\left(1 - \frac{4}{2}r\right)e^{-4r/2} = 2^{5/2}(1-2r)e^{-2r}$

$$\to (R_{20}, rR_{20}) = 2^5 \int_0^\infty (1-2r)^2 r^3 e^{-4r} dr = 32 \int_0^\infty (1 + 4r^2 - 4r) r^3 e^{-4r} dr =$$

www.pmoiras.weebly.com panmoiras@gmail.com 6932 946778

$$= 32\left[\int_0^\infty r^3 e^{-4r}\,dr + 4\int_0^\infty r^5 e^{-4r}\,dr - 4\int_0^\infty r^4 e^{-4r}\,dr\right] =$$

$$= 32\left[\frac{3!}{4^4} + 4\cdot\frac{5!}{4^6} - 4\cdot\frac{4!}{4^5}\right] = 32\left(\frac{6}{256} + \frac{480}{4096} - \frac{96}{1024}\right) =$$

$$= 32\left(\frac{96}{4096} + \frac{480}{4096} - \frac{384}{4096}\right) = \cancel{32}\cdot\frac{192}{\cancel{4096}_{128}} = \frac{3}{2} \quad (5)$$

• $(R_{20}, rR_{10}) = \int_0^\infty R_{20}^* \, r R_{10} \, r^2\,dr$ →

με $R_{20} = 2^{5/2}(1-2r)e^{-2r}$ και $R_{10} = 2\cdot 4^{3/2} e^{-4r}$

$$\to (R_{20}, rR_{10}) = \int_0^\infty 2^{5/2}(1-2r)e^{-2r}\, r\, 2\cdot \cancel{4^{3/2}}^{\,2^3} e^{-4r} r^2\,dr =$$

$$= 16\cdot 2^{5/2}\int_0^\infty r^3(1-2r)e^{-6r}\,dr = 90{,}5\left[\int_0^\infty r^3 e^{-6r}\,dr - 2\int_0^\infty r^4 e^{-6r}\,dr\right] =$$

$$= 90{,}5\left[\frac{3!}{6^4} - 2\cdot\frac{4!}{6^5}\right] = 90{,}5\left(\frac{6}{1296} - \frac{48}{7776}\right) =$$

$$= 90{,}5(0{,}00473 - 0{,}00617) = 90{,}5(-0{,}00144) = -0{,}13 \quad (6)$$

• $$(R_{10}, rR_{10}) = \int_0^\infty R_{10}^* r R_{10} r^2 dr = \int_0^\infty |R_{10}|^2 r^2 dr = 2^2 \cdot 4^3 \int_0^\infty e^{-8r} r^2 dr =$$

$$= 4 \cdot 4^3 \frac{2!}{8^3} = \frac{512}{512} = 1 \quad (7)$$

Άρα η (4) λόγω των (5), (6), (7) γίνεται:

$$\langle r \rangle = \frac{1}{2}\left(\frac{3}{2} - 0{,}26\cos w + 1\right) = 0{,}75 - 0{,}13\cos w + 0{,}5 \rightarrow$$

$$\rightarrow \boxed{\langle r \rangle = 1{,}25 - 0{,}13\cos w} \quad (8)$$

Επίσης κατά τον ίδιο τρόπο:

$$\langle r^2 \rangle = \frac{1}{2}\left[(R_{20}, r^2 R_{20}) + 2\cos w (R_{20}, r^2 R_{10}) + (R_{10}, r^2 R_{10})\right] \quad (9)$$

όπου • $$(R_{20}, r^2 R_{20}) = \ldots = 32 \int_0^\infty (1 + 4r^2 - 4r) r^4 e^{-4r} dr =$$

$$= 32\left[\int_0^\infty r^4 e^{-4r} dr + 4\int_0^\infty r^6 e^{-4r} dr - 4\int_0^\infty r^5 e^{-4r} dr\right] =$$

$$= 32\left[\frac{4!}{4^5} + \cancel{4}\cdot\frac{6!}{4^{\cancel{7}6}} - \cancel{4}\,\frac{5!}{4^{\cancel{6}5}}\right] = 32\left(\frac{24}{1024} + \frac{720}{4096} - \frac{120}{1024}\right) =$$

$$= 32\left(\frac{720}{4096} - \frac{96}{1024}\right) = 32\,\frac{(720-384)}{4096} = \cancel{32}\cdot\frac{336}{\cancel{4096}_{128}} = 2{,}62 \quad (10)$$

- $(R_{20}, r^2 R_{10}) = \ldots = 90{,}5\int_0^\infty r^4(1-2r)\,e^{-6r}\,dr =$

$$= 90{,}5\left[\int_0^\infty r^4 e^{-6r}\,dr - 2\int_0^\infty r^5 e^{-6r}\,dr\right] =$$

$$= 90{,}5\left[\frac{4!}{6^5} - 2\,\frac{5!}{6^6}\right] = 90{,}5\left(\frac{24}{7776} - \frac{240}{46656}\right) =$$

$$= 90{,}5\left(\frac{144-240}{46656}\right) = 90{,}5\cdot(-0{,}00206) = -0{,}186 \quad (11)$$

- $(R_{10}, r^2 R_{10}) = \ldots = 2^2\cdot 4^3\int_0^\infty r^3 e^{-8r}\,dr = 4\cdot 4^3\,\frac{3!}{8^4} = \frac{1536}{4096} = 0{,}375 \quad (12)$

Συνεπώς η (9) λόγω των (10), (11), (12) δίνει:

$$\langle r^2\rangle = \frac{1}{2}\left(2{,}62 - 2\cdot 0{,}186\cos w + 0{,}375\right) = 1{,}31 - 0{,}186\cos w + 0{,}187 \rightarrow$$

$$\rightarrow \langle r^2\rangle = 1{,}4975 - 0{,}186\cos w \quad (13)$$

Άρα η αβεβαιότητα της θέσης r είναι:

$$\Delta r=\sqrt{\langle r^2\rangle-\langle r\rangle^2}\overset{(8,13)}{=}\sqrt{1{,}4975-0{,}186\cos w-(1{,}25-0{,}13\cos w)^2}=$$

$$=\sqrt{1{,}4975-0{,}186\cos w-1{,}5625-0{,}0169\cos^2 w+0{,}325\cos w}\rightarrow$$

$$\rightarrow\boxed{\Delta r=\sqrt{0{,}139\cos w-0{,}0169\cos^2 w-0{,}065}}$$