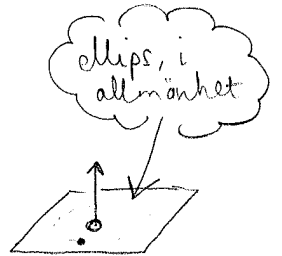


Inlämningsuppg. 1, Fk2003, Lösningsförslag

a) total energi $E_{\text{tot}} = E_{\text{kinetisk}} + V$

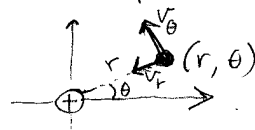
$$E_{\text{kinetisk}} = \frac{m|\vec{v}|^2}{2}$$

L bevarat $\Rightarrow$ rörelsen sker i ett plan



In för polära koordinater i planet, (r, θ)

$$|\vec{v}|^2 = v_r^2 + v_\theta^2$$



(Stabil bana $\Rightarrow v_r = 0$ om cirkulär, annars $v_r \neq 0$)

Rotat. kinetiska energin: $E_{\text{kinetisk}, \theta} = \frac{mv_\theta^2}{2}$

$$L = mv_\theta r, \text{ dvs. } E_{\text{kinetisk}, \theta} = \frac{m(\frac{L}{mr})^2}{2} = \frac{L^2}{2mr^2}$$

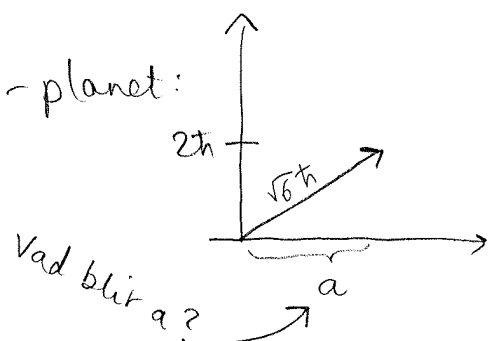
Eftersom L är konstant är detta helt uttryckt i r (utan v), så vi kan inkludera det i potentiella energin, om vi vill.

b) $|\vec{L}|^2 = 2 \cdot (2+1) \hbar^2 \Rightarrow |\vec{L}| = \sqrt{6} \hbar$ för alla $l=2$ -tillstånd

$$L_z = -2\hbar, -\hbar, 0\hbar, +\hbar, +2\hbar \text{ dvs. 5 olika}$$

Börja med $L_z = +2\hbar$

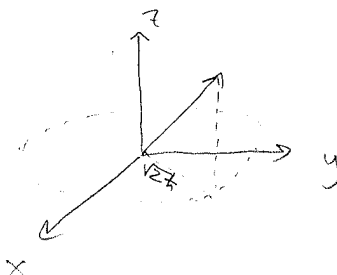
i t.ex xz -planet:



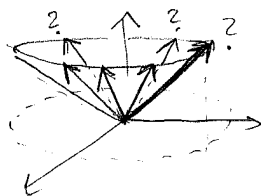
Vi ser (Pythagoras) att $a = \sqrt{6h^2 - 4h^2} = \sqrt{2}h$.

Men vi får samma längd om vi ritat yz -planet.

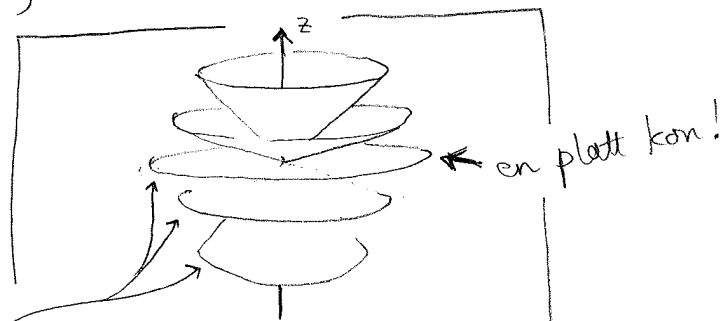
Det enda vi vet är att radien i xy -planet är $\sqrt{2}h$.



Det mest försiktiga
sättet att rita är alltså en figur som sveps ut
av alla möjliga sådana vektorer, vilket ger en kon.



Totalt får vi, med alla 5 tillstånd (samma längd),



(skall vara
skärning mellan konerna och sfären $|\vec{L}|^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2 = 6h^2$.)

Detta kan verka trassligt och ibland röjer man
sig med att rita bilden på förra sidan i
2 dimensioner, vilket inte är fel i sig, men
kan ge det felaktiga intrycket att $L_x = a = \sqrt{2}h$,
när L_x i själva verket är obestämd: $\Delta L_x \Delta L_z \gtrsim \frac{\hbar}{2}$.
(samma gäller för L_y).

c)

Nu börjar det bli svårare.

Som tur är blir det inte så svårt på tentan.

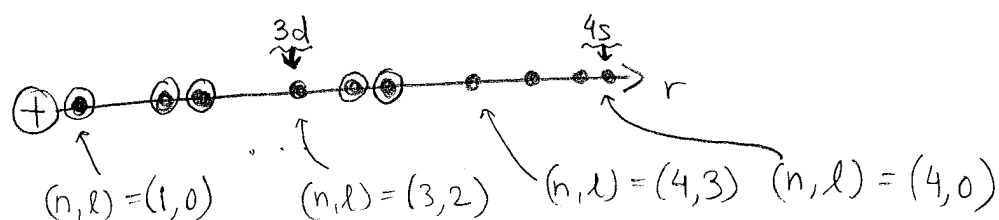
I "riktig fysik" måste man tänka lite själv, inte alltid tro att svaret är unikt bestämt innan man hjälpt till att definiera frågan, och ytterst bestämmer experiment om vi har rätt eller fel.

Så, om vi tar formeln

$$\langle r \rangle_{nl} = \frac{a_0}{2Z} (3n^2 - l(l+1)) \quad (*)$$

bokstavligen, ser vi direkt att det inte verkar stämma med vad Feynman säger på s. 19-13, "the higher the l , the more the amplitudes are pushed away from the center.", för om l ökar, minskar $\langle r \rangle$.

Men vi fortsätter. En ritning av (*):

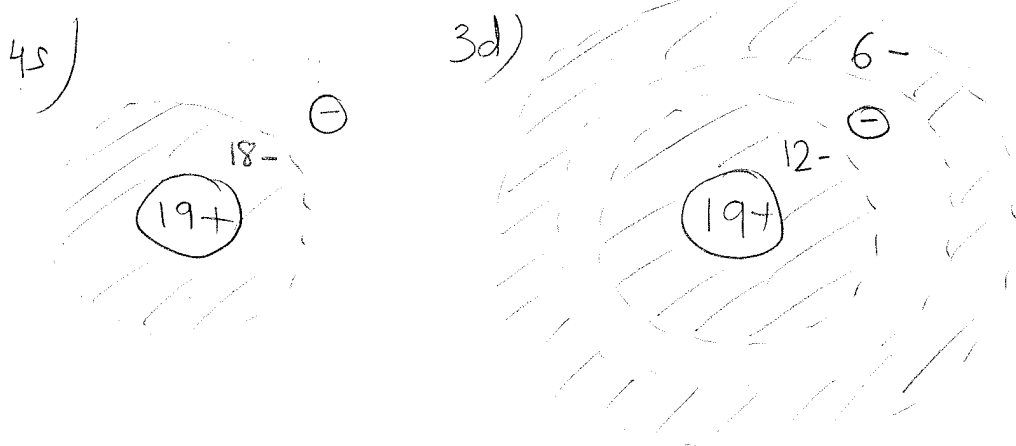


Vi har enligt tabell 19-2 fyllda skal för $1s$ ($n=1, l=0$), $2s$ ($n=2, l=0$), $2p$ ($n=2, l=1$), $3s$ ($n=3, l=0$) och $3p$ ($n=3, l=1$), som jag gjort dubbelcirkel för, totalt

$$2 + 2 + 6 + 2 + 6 = 18 \text{ elektroner.}$$

Var hamnar nr. 19 i det här gyttret?

Låt oss anta att de andra elektronerna inte "flyttar om" sig när vi lägger till nummer 19. Då verkar det från min graf som om 4s hamnar ytterst, men 3d hamnar innanför $2+6 = 8$ elektroner i 3s och 3p.



Då får vi effektivt $Z = 1$ för 4s ($+19 - 18 = +1$)
 $Z = 7$ för 3d ($+19 - 12 = +7$)

Andra tolkningar är möjliga. Vad ger min tolkning?

$$\langle r \rangle_{4s} = 12 \text{ Å} \quad (= 1,2 \text{ nm})$$

$$\langle r \rangle_{3d} = 0,79 \text{ Å}$$

Men nu hamnade $\langle r \rangle_{3d}$ (delat) innerst, för
 $\langle r \rangle_{1s} = 0,79 \text{ Å}$ också.

Det är alltså för "brutalt" att sätta $Z = 7$ för 3d, dvs. de andra elektronerna skulle arrangera om sig om detta var fallet. Så ett "bättre" värde på Z för 3d vore någonstans mellan 1 och 7.

(Du får rätt för alla sådana värden, bara du har förstått frågan!)

Men påverkar det inte resultatet vad Z_{3d} är?

Vi räknar ut energierna "halvklassiskt" ($r = \langle r \rangle_{nl}$)

$$E_{4s} = -k \frac{e^2}{\langle r \rangle_{4s}} = -1,1 \text{ eV} \quad (Z_{4s} = 1)$$

$$E_{3d} = -k \frac{Z_{3d} e^2}{\langle r \rangle_{3d}} + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2m \langle r \rangle_{3d}^2} = (-1,8 \text{ eV}) \cdot Z_{3d}$$

(Enhetsnotis: man kan konvertera till elektronvolts-energier om man räknar ut $\frac{k \cdot e}{r}$, men i SI-enheter är $V_d = -k \frac{q_1 q_2}{r} = -k \cdot \frac{Z e^2}{r}$.)

Så vi ser att vad vi än stappar in för Z_{3d}

(1, 2, ..., 19) så får vi att 3d har lägre energi ("mer bunden") än 4s.



Det närmsta vi kan komma är $Z_{3d} = 1$, då

$$\begin{aligned} \text{får vi } \Delta E_{\text{tot}} &= E_{4s} - E_{3d} = -1,1 \text{ eV} - (-1,8 \text{ eV}) \\ &= +0,7 \text{ eV}, \end{aligned}$$

(dvs. 4s ovanför 3d med 0,7 eV)

Stuntar vi i L-bidraget till energin, $\frac{l(l+1)\hbar^2}{2m \langle r \rangle_{3d}^2}$, blir det fortfarande samma svar,

att $\Delta E > 0$ (Jag ser hellet att du tar med det! Men det är OK utan här.)

Så detta kan inte förklara Feynmans figur 19-8, där uppenbarligen $\Delta E = E_{4s} - E_{3d} < 0$ (lite, men ändå).

d) Om nu fig 19-8 hade stämt, är det lätt att förklara varför 4s fylls på före 3d, för tillstånd med lägre total energi är mest stabila. Då borde kalium fylla på 19:e elektronen i 4s, inte i 3d. Så är det ju också.

ÖVERKURS : Sensmoral !

(dvs. inte på tentan...)

Vad skall man dra för slutsats av detta?

Jo, Feynman säger ju att periodiska systemet för atomer ovanför litium är svåra att förstå med enkla argument. (Idag använder man stora datorräkningar.) Det är viktigt för fig 19-8, som alltså beskriver verkligheten, att elektronen är "längre bort" från kärnan för högre l , som Feynman skriver på s. 19-13.

Faktum är att den "halvklassiska" bilden av en elektron som cirkulerar vid någon klassisk banradie $\langle r \rangle_{nl}$ helt enkelt är allt för klassisk. Man kan faktiskt visa att

$$\left\langle \frac{1}{r} \right\rangle_{nl} = \frac{Z}{a_0 n^2} \neq \frac{1}{\langle r \rangle_{nl}} !$$

så man finner att den elektrostatiska energin i medelvärde inte alls beror på l i den här approximationen — vilket man ser i Feynman fig 19-7.

Meningen med uppgift c) och d) var, som jag skriver i uppgiften, att "prova". Men så lätt går det alltså inte.

Vi kan dra en till slutsats, att det måste vara delvis sant som Feynman skriver, att Gauss lag faktiskt spelar roll, men att radien man skall föreställa sig inte är den som man kan räkna ut (via $\langle r \rangle_{nl}$) på enklaste sätt. Idag finns sk.

"variations-tekniker", då man gör det bättre, men det är komplicerat. För en hyfsad tumregel, se "Slater's rule" på Wikipedia. Men fig. 19-8 fångar det viktiga.

Och till sist, varför 2, 8, 18, ... elektroner?
 Jo, i uppgift b) såg vi att $l=2$ har 5 tillstånd, men det är ju 2 spintillstånd $\uparrow, \downarrow$ för varje, så totalt $2 \times 5 = \underline{10}$. Sedan har vi ju $l=1$ också ($-h, 0h, +h \rightarrow 3$ tillstånd $\times 2$ för spin = 6) och $l=0$ (1 tillstånd, $\times 2 = \underline{2}), så totalt $2 + 6 + 10 = \underline{18}$ i 3:e skalet. ($l_{\max} = n-1$)$

Lustigt faktum: detta är $18 = 2 \cdot 9 = 2 \cdot 3^2$.

I allmänhet $2l+1$ l -tillstånd, så totalt $\sum_{l=0}^{n-1} 2l+1$.

$$\begin{aligned} \text{Men notera att } l^2 &= ((l-1)+1)^2 = (l-1)^2 + 2(l-1) \cdot 1 + 1^2 \\ &= (l-1)^2 + (2l+1) \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \text{rekursion } l^2 = 2l+1 + (l-1)^2$$

$$= (2l+1) + (2(l-1)+1) + (l-2)^2$$

$$= \sum_{l=0}^{l_{\max}} (2l+1)$$

$$\text{så } 2 \cdot \sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = 2 \cdot n^2$$

$$= 2, 8, 18, \dots$$

← fortsätt från $l_{\max}$ ned till 0