Zadanie dodatkowe
Rozkład prawdopodobieństwa w atomie wodoru

Funkcja stanu elektronu w atomie wodoru ma postać

$\psi = R_{n\,l}(\mathrm{r})\; Y_{l\,m}(\theta,\phi)$

gdzie r,θ,ϕ to współrzedne radialne, a liczby n,l,m to główna , orbitarna i magentyczna liczba kwantowa

Funkcja $R_{n\,l}$ spełnia równanie:

$$0 = \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} - \frac{l(l+1)}{r^2} + \frac{2}{\mathrm{a0}\,r} - \frac{1}{\mathrm{a0}^2\,n^2}\right)R_{n\,l}(\mathrm{r})$$

oraz warunek:

$u_{n\,l}(0)=0$

gdzie $u_{n\,l}(\mathrm{r})=r * R_{n\,l}(\mathrm{r})$

Stała a0 to promien Bohra równy $\frac{4\,\pi\,\epsilon\,\hbar^2}{M\,e^2}$~ 0,529 A

//

(Dygresja niekonieczna dla rozwiązania zadania:)

Powyższe równanie powstalo z przekształcen rownania Schroedingera

$\hat{H}\;\psi = E_n\psi$

$\hat{H} = \hat{E}_k + \hat{V}$

Energia kinetyczna

$$\hat{E}_k\psi = -\frac{\hbar^2}{2\,M}\Delta\psi = -\frac{\hbar^2}{2\,M}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} - \frac{\hat{L}^2}{\hbar^2\,r^2}\right)\psi$$

Energia potencjalna (oddzialywanie coulombowskie)

$$\hat{V}\psi = -\frac{e^2}{4\,\pi\,\epsilon\,r}\,\psi$$

Wartosci wlasne energii zaleza tylko od glownej liczby kwantowej n:

$$E_n = -\frac{\hbar^2}{2\,M\,\mathrm{a0}^2}\frac{1}{n^2}$$

(koniec dygresji)

//

Polecenia:

a) w formule

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} - \frac{l(l+1)}{r^2} + \frac{2}{a\,r} - \frac{1}{a^2\,n^2}\right)R(\mathrm{r})$$

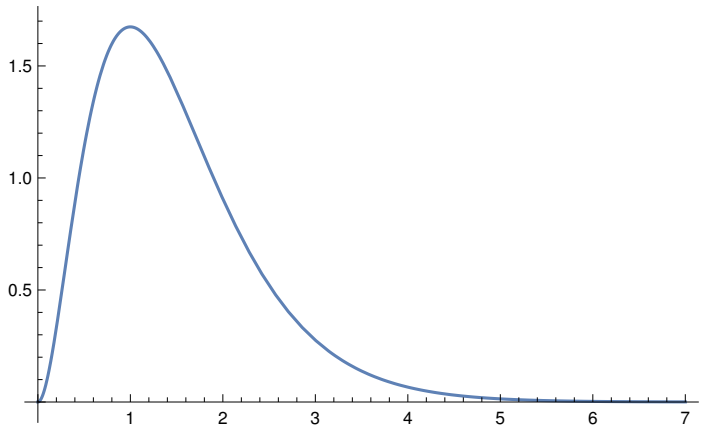
dokonaj podstawienia R[r]-> u[r]/r , R'[r] -> D[u[r]/r,r] , R''[r] -> D[u[r]/r,{r,2}]
aby uzyskac rownanie różniczkowe dla funkcji u(r)

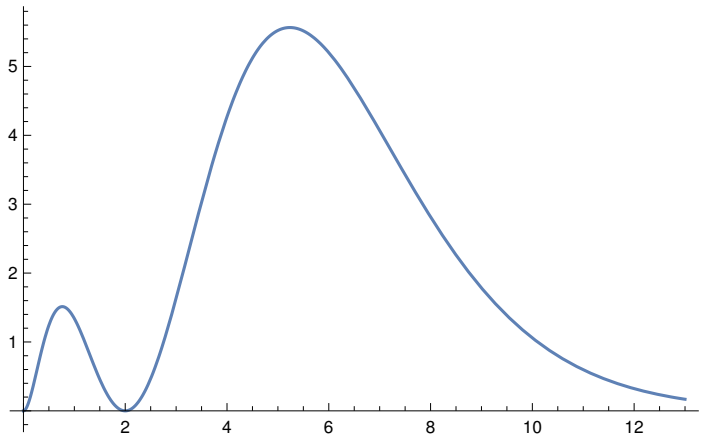
b) Rozwiaz rownanie na u(r) z warunkiem u(0)=0 dla dwóch przypadków
- wartosci liczb kwantowych n=1 , l=0 (orbital 1s)
- wartosci liczb kwantowych n=2 , l=0 (orbital 2s)

c) Przyjmujemy za jednostkę promień Bohra, w więc a0=1

d) Policz calke $u(x)^2$ od 0 do ∞
nastepnie narysuj wykres funkcji $u(x)^2$/(policzona calka)
Bedzie to rozklad prawdopodobienstwa znalezienia elektronu w atomie wodoru w sferze w odleglosci r od środka

Otrzymane wykresy powinny wygladac tak




5
4
3
2
1
2
4
6
8
10
12