

Domače naloge iz Atomske Fizike, zimski semester 2015/16

-
-
1. Izračunaj energijo osnovnega ter energije enojno vzbujenih stanj prostega atoma Li $1s^2nl$ za $n \leq 7$. Pri tem uporabi tri nivoje natančnosti: približek vodikovega atoma, enokonfiguracijski Hartree - Fockov približek (HF) ter večkonfiguracijski HF približek (MCHF). Pri tem uporabi programski paket ATSP. Izračunaj še najmanjšo energijo, ki je potrebna za izbitje enega, dveh ali vseh treh elektronov iz atoma ter energijo najnižje ležečega dvojno vzbujenega stanja Li $1snl'n'l'$. Rezultate primerjaj s tistimi, ki jih dobiš na naslovu:

http://physics.nist.gov/PhysRefData/ASD/levels_form.html

Mateja Hrast

2. Rešitve sistema diferencialnih enačb HF določajo oblike radialnih funkcij, ki skupaj s kotnimi in spinskimi deli opisujejo elektrone v posameznih orbitalah. Če se *a priori* omejimo na vodik podobne radialne orbitale z efektivnim nabojem Z_{ef} in tako kot v modelu HF minimiziramo energijo izbrane konfiguracije elektronov, pridemo do sistema algebraskih enačb za efektivne naboje radialnih orbital, ki tvorijo konfiguracijo.

Zapiši in reši tak sistem enačb za osnovno stanje atoma C ter primerjaj rezultate (radialne funkcije in energije) z rezultatom modela HF (paket ATSP) za tri multiplete konfiguracije osnovnega stanja. Kako se razlikuje rezultat, če v modelu z efektivnimi naboji zanemariš izmenjalno interakcijo (prispevke Slaterjevih integralov tipa G)? Izračunane efektivne naboje primerjaj še z efektivnimi naboji, ki jih za izbrano konfiguracijo predpisuje J. C. Slater že od leta 1930 (https://en.wikipedia.org/wiki/Slater%27s_rules).

Mimoza Naseska

3. V konfiguraciji osnovnega stanja dvakrat nabitega argonovega iona manjkata dva elektrona v podlupini 3p, tako da je nivo v LS sklopitvi razcepljen na tri multiplete. Izračunaj energije teh multipletov v modelu HF in razišči, kaj se zgodi z nivoji, če upoštevas popravek zaradi interakcije spin-tir. Rezultat računa primerjaj z vrednostmi energij, ki jih poiščeš na naslovu:

http://physics.nist.gov/PhysRefData/ASD/levels_form.html

Račun ponovi in primerjaj rezultat za konfiguracije, kjer iz konfiguracije osnovnega stanja Ar^{2+} zaporedoma odstanjuješ polne podlupine elektronov, naj-

prej $3s$ (dobiš Ar^{4+}), potem $2p$ (dobiš Ar^{10+}), $2s$ (dobiš Ar^{12+}) in končno še $1s$, tako da je končna konfiguracija iona $\text{Ar}^{14+} 3p^4$. Opazuj kako se spreminja razcep spin-tir glede na razcep nivoja konfiguracije zaradi elektrostatske interakcije in po potrebi zamenjaj perturbacijsko shemo (LS razcep zaradi elektrostatske interakcije obravnavaš perturbativno glede na jj razcep zaradi sklopitve spin-tir namesto obratno).

Če ostanemo pri začetni konfiguraciji iona $\text{Ar}^{2+} 3p^{-2}$ in namesto da odstranimo 12 elektronov povečamo naboj jedra za 12 ($Z=30$), kakšen razcep dobimo?

Amina Alić

4. Izračunaj energije in relativne intenzitete spektralnih črt za prehode $1s^2 5l \rightarrow 1s^2 3s$ v atomu Li, ki se nahaja v statičnem električnem polju z jakostjo 10 kV/cm. Zanima nas spekter svetlobe, ki se izseva v smeri pravokotno na zunanje polje, vzdolž katerega je poravnana os z koordinatnega sistema. Število izsevanih fotonov s polarizacijo $\hat{e}$ na časovno enoto pri prehodu iz izbranega začetnega (i) v izbrano končno stanje (f) je sorazmerno z verjetnostjo za električni dipolni prehod na časovno enoto:

$$w_{if} = \frac{4}{3} (\alpha \Delta E_{if})^3 |\langle \phi_f | \hat{e} \cdot \vec{r} | \psi_i \rangle|^2$$

Namig: upoštevaj, da v zahtevani smeri, recimo smer $\hat{x}$, k fotonskemu signalu prispevata dve polarizaciji: $\hat{e} = \hat{z} = C_{10}$ ter $\hat{e} = \hat{y} = (i/\sqrt{2})(C_{1-1} - C_{11})$. Začetna in končna stanja v električnem polju izraziš s stanji prostega atoma za vsak n posebej in sicer tako, da diagonaliziraš ustrezno Hamiltonovo matriko v bazi $n = 5$ in $n = 3$. Stanja prostega atoma lahko opišeš v približku enega elektrona, ki predvideva isto orbitalo $1s$ za vse konfiguracije dodatnega elektrona.

Taj Jankovič

5. Za vodikov atom velja, da je Starkov razcep linearen s poljem F , dokler ni tako velik, da se med sabo začnejo mešati stanja, ki pripadajo različnim glavnim kvantnim številom n . Ko postane razcep primerljiv z energijsko razliko sosednjih nivojev v prostem vodikovem atomu, za izračun več ne zadošča diagonalizacija Hamiltonove matrike (ki vsebuje tudi interakcijo z zunanjim poljem) v bazi stanj $n = 5$, ampak je treba matriko diagonalizirati v večji bazi, ki vključuje stanja z manjšim, predvsem pa večjim n . Izračunaj Starkov razcep nivoja $n = 5$ v zunanjem statičnem električnem polju jakosti 100 kV/cm tako, da začneš z bazo vodikovih funkcij za $n = 5$, potem pa bazi postopoma dodajš bazna stanja z $n = n \pm 1, n \pm 2, \dots$ dokler rezultat ne skonvergira.

Jaka Šircelj

6. Trk s hitrim projektilom izbije elektron iz podlupine $4d$ v atomu ksenona in mu podeli asimptotsko energijo ϵ . Podobno kot razvijemo v krogelne valove

z vrtilno količino l ravni val, ki opisuje popolnoma prost elektron z energijo $\epsilon = k^2/2$:

$$e^{ikr} = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l j_l(kr) P_l(\vec{k} \cdot \vec{r}),$$

lahko razvijemo v krogelne valove tudi valovno funkcijo izbitega elektrona:

$$\psi(\vec{k}, \vec{r}) = \sum_{l=0}^{\infty} A_l i^l (2l+1) R_l(\epsilon, r) P_l(\vec{k} \cdot \vec{r}).$$

Izračunaj asimptotski fazni premik krogelnega vala R_1 in R_3 (krogelni val $l = 1, 3$) glede na fazni premik krogelnega vala v potencialu $-1/r + l(l+1)/(2r^2)$. Nariši oba fazna premika v odvisnosti od energije izbitega elektrona na območju $1 \leq \epsilon \leq 150$ eV. Za radialno simetrični efektivni potencial, v katerem se giblje izbiti elektron, vzemi potencial, ki ga ustvarja ion Xe^+ z eno vrzeljo v podlupini $4d$. Če poznaš radialne orbitale P_{n,l_i} vseh elektronov v ionu, lahko ionski potencial oceniš takole:

$$U(r) = -\frac{Z}{r} + \sum_{i=1}^{N-1} \left[\frac{1}{r} \int_0^r P_{n_i,l_i}^2(r_i) dr_i + \int_r^\infty \frac{1}{r_i} P_{n_i,l_i}^2(r_i) dr_i \right]$$

Vsota teče po vseh $N - 1$ elektronih v ionu, Z je naboj jedra.

Namig: radialne orbitale za konfiguracijo $\text{Xe}^+ 4d^{-1}$ izračunaj v približku HF (paket ATSP), reši Schrödingerjevo enačbo za prosti elektron izbrane energije v ionskem potencialu ter primerjaj potek rešitve s potekom ustrezne regularne Coulombske funkcije pri veliki oddaljenosti od jedra. Razdalja mora biti dovolj velika, da iskana fazna razlika od nje ni več odvisna.

Andrej Novak

7. Izračunaj energije električnih dipolnih prehodov iz enojno vzbujenih stanj $\text{Be } 1s^2 2s^2 3p^1$ v osnovno stanje $1s^2 2s^2$. Kako se spremeni oblika spektra (energije električnih dipolnih prehodov), če se Be nahaja v zunanjem magnetnem polju z jakostjo 10^{-3} T in 1 T? Začetno in končno konfiguracijo atoma izračunaj v približku HF, interakcijo spin-tir ter interakcijo z zunanjim magnetnim poljem pa obravnavaj kot perturbaciji s hierarhijo (v šibkem polju najprej perturbativno upoštevamo interakcijo spin-tir in potem pa še interakcijo z magnetnim poljem, v zelo močnem polju pa utegne biti smiselna ravno obratna obravnava) ali brez hierarhije (če ne poznamo relativne jakosti interakcij ju pač seštejemo in obravnavamo kot skupno perturbacijo). Razišči razcep začetnega stanja v odvisnosti od jakosti magnetnega polja in pokaži, da se rezultat hierarhične obravnave dobro ujema z rezultatom skupne perturbacije le za majhne in velike jakosti magnetnega polja.

Žiga Barba

8. Izračunaj radialno odvisnost centralno simetričnega potenciala, ustrezne gostote naboja ter energijo osnovnega stanja za Kr s statističnim modelom atoma Thomas-Fermi (TF). Zadnji dve količini primerjaj z rezultatom modela Hartree-Fock za isti atomski sistem. Izračunaj še potencial TF za atom s 35 elektroni ter nabojem jedra $Z = 36$ ter v njem naračunaj radialno orbitalo $5p$ (to je tista eksponentno padajoča rešitev radialne Schrödingerjeve enačbe s potencialom TF za $l = 1$, ki trikrat spremeni predznak). Primerjaj obliko orbitale z obliko orbitale $P_{5p}(r)$, ki jo dobiš iz modela HF za osnovno stanje Kr.

Špela Krušič

9. V prostem atomu vodika so orbitale z istim glavnim kvantnim številom degenerirane, tako da je atom je z enako verjetnostjo v vzbujenih stanjih $2s_0$, $2p_0$, $2p_1$ in $2p_{-1}$. Kako odpravi degeneracijo $n = 2$ stanj prisotnost naboja -1 na fiksni razdalji 10 a.u. od jedra vodika? Razišči, kaj se dogaja z razcepom in kako se spreminjajo orbitale, če postopoma dodajamo enake naboje, najprej na nasprotni strani atoma, potem v pravokotni smeri, itd, dokler ni okrog vodika simetrično razporejenih 6 nabojev na razdalji 10 a.u. Perturbacijo obravnavaj v najnižjem redu, tako da razviješ potencial v bližini izhodišča, kjer je največja verjetnost, da se nahaja elektron.

Jaka Vodeb

10. Izračunaj življenski čas vzbujenega muonskega atoma, kjer sta muon in proton v vezanem stanju z glavnim kvantnim številom $n = 5$. Oцени velikost takega atoma in razišči, ali za opis sevalnega razpada še vedno zadošča dipolni približek. Izračunan življenski čas primerjaj z življenskim časom prehoda $n = 5 \rightarrow n = 1$ v vodikovem atomu in življenskim časom istoležnega prehoda v pozitroniju, vezanem sistemu elektrona in pozitrona. Kakšna bi bila energija osnovnega stanja atoma, ki ga sestavljajo He jedro, elektron in muon?

Namig: problem treh teles približno rešis tako, da izračunaš najnižjo vezavno energijo "zunanjega" delca v ionskem potencialu, ki ga generirata jedro He ter "notranji" delec.

Tadej Novak