

KJM 1060 - Radiokjemidelen

Forelesning 3: Skallmodellen

45

Partikkel i boks - en dimensjon

$$\frac{d^2 \psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E \psi = 0$$

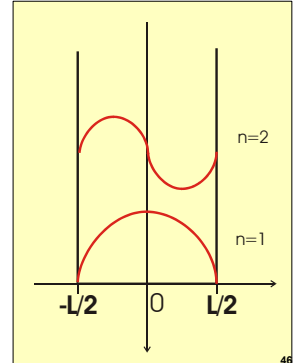
$$E_n = -V_0 + \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2mL^2}$$

$$\psi_n = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n\pi(x + \frac{1}{2})}{L}$$

der $n = 1, 2, 3, \dots$

Sannsynligheten for å finne partikkelen mellom x og $x+dx$ er:

$$p(x)dx = \psi^2 dx$$



46

Partikkel i boks - tre dimensjoner

- Virkelige systemer har tre dimensjoner!
- Bølgefunksjonen må da være en bølge i alle tre dimensjoner.
- Siden vi arbeider med sfæriske systemer, er det mest praktisk å bruke sfæriske koordinater (r, θ og ϕ).

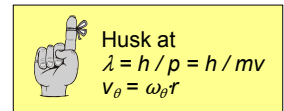
47

Partikkel i boks - θ -retningen

Bølgen i θ -retningen må bestå av et heltallig antall bølgelengder per omdreining:

$$2\pi r = l\lambda_\theta = \frac{lh}{mv_\theta} = \frac{lh}{m\omega_\theta r}$$

der l er et heltall og $\omega = d\theta/dt$ (vinkelhastigheten).



48

Angulærmoment

Vi har da:

$$2\pi r = \frac{lh}{m\omega r}$$

Uttrykket for (klassisk) angulærmoment er gitt ved:

$$L = mvr = m\omega r^2 = \frac{lh}{2\pi} = l\hbar$$

- Vi ser at kravet om at bølgefunksjonen skal være kvantisert i θ -retningen fører til at **angulærmomentet også må være kvantisert.**

- En mer nøyaktig behandling gir at $L = \sqrt{l(l+1)}\hbar$

49

Partikkel i boks - r -retningen

- Også i r -retningen må bølgefunksjonen være en bølge.
- En mer hensiktsmessig funksjonen $u(r)$ er $r\psi_r$.
 - $u(r)$ har egenskapen at $p(r)dr$, sannsynlighet for å finne partikkelen i området mellom r og $r+dr$ er gitt ved:

$$p(r)dr = \int_{\theta, \phi} \psi^2 r^2 \sin\theta dr d\theta d\phi \propto u^2 dr$$

- Dette er analogt med sannsynlighetsfunksjonen for den en-dimensjonale partikkelen.

- Hvis partikkelen er i en potensialbrønn $V(r)$, vil $u(r)$ -funksjonens bølgelengde være gitt av $\lambda = h / mv$.

50

Sentrifugalpotensialet

- Vi må ta hensyn til at bevegelsen i θ -retningen gir opphav til en kraft i r-retningen: Sentrifugalkraften $F_{cf} = m\omega^2 r$
- Da vil

$$F_{cf} = \frac{L^2}{mr^3} = \frac{l(l+1)\hbar^2}{mr^3}$$

Husk:
 $L = m\omega r^2$

- Sentrifugalpotensialet blir da

$$V_{cf} = \int F_{cf} dr = \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2}$$

51

Schrödinger ligningen for $u(r)$

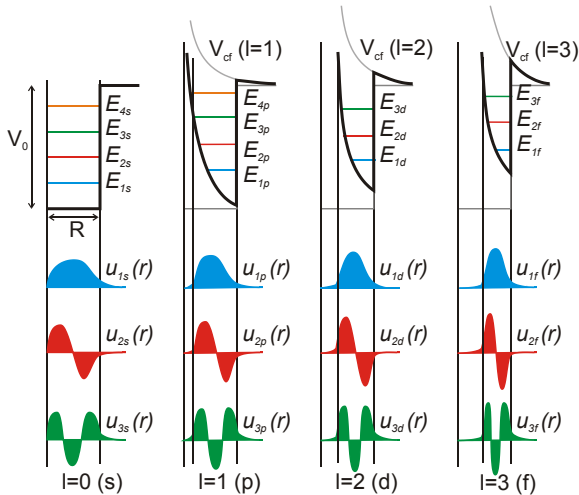
$$-\frac{\hbar}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi + V \psi = E \psi$$

Potensialet V er nå lik $V(r) + V_{cf}$, da må

$$-\frac{\hbar}{2m} \frac{d^2}{dr^2} u(r) + \left[V(r) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} \right] u(r) = E u$$

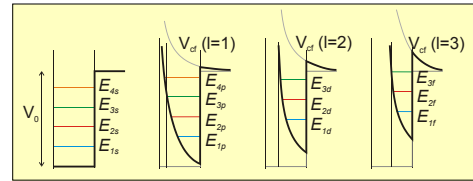
Vi ser at dette er samme likning som for den en-dimensjonale boksen, men at vi får et sett løsninger for hvert l -kvantetall.

52



53

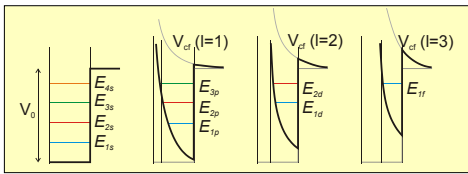
Partikkel i tredimensjonal boks - konsekvenser



- Når l øker, blir potensialet grunnere og smallere.
 - ▶ Det medfører at energinivåene skyves oppover, men avstanden mellom dem forblir den samme.
 - ▶ Denne effekten er den samme uansett hva slags potensialbrønn man tar utgangspunkt i.

54

Partikkel i tredimensjonal boks - H-atomet



- For $1/r$ potensiallet man ofte bruker for H-*atomet* blir orbitalenergiene dyttet så langt opp at:

$$E_{n,l} = E_{(n+1),l-1} = \dots = E_{(n+1),0}$$

- Det er derfor viktig å merke seg at kvantetallet n ofte benyttet for *atomer* tilsvarer $n+l$ i vår notasjon!
- Kjernepotensialene er mer like firkantboks-potensialene og forskyvningen av $E_{n,l}$ som funksjon av l er mye mindre.

55

Partikkel i boks - ϕ -retningen

- Som for θ -retningen må bevegelsen i ϕ -retningen også være en bølge som ikke interferer med seg selv.
- Radien til denne sirkelbevegelsen er $r \sin \theta$, da må

$$2\pi r \sin \theta = m_l \lambda_\phi = m_l \frac{h}{mv_\phi} = \frac{m_l h}{m \omega_\phi r \sin \theta}$$

der m_l er et heltall og ω_ϕ er ϕ -komponenten av angulærmomentet.

56

Partikkel i boks - ϕ -retningen

Fra klassisk mekanikk har vi at z-komponenten av bane-angulærmomentet er

$$L_z = mr^2 \sin^2 \theta \omega_\phi$$

Kombinerer vi den med

$$2\pi r \sin \theta = m_l \lambda_\phi = m_l \frac{h}{mv_\phi} = \frac{m_l h}{m \omega_\phi r \sin \theta}$$

får vi at

$$L_z = \frac{m_l h}{2\pi} = m_l \hbar$$

57

Kvantetallet m_l

$$L_z = \frac{m_l h}{2\pi} = m_l \hbar$$

- Vi ser at angulærmomentet i ϕ -retningen, L_z , er kvantisert.
- Siden $L_z < L$, så må også $|m_l| < l$.
- m_l kan derfor ha $2l+1$ forskjellige verdier ($-l, -l+1, \dots, 0, l-1, l$).
- Det er ingen grunn til at energien skal være avhengig av hvilken retning angulærmomentet peker, derfor vil **energien være uavhengig av m_l** .
 - For hver E_n vil det derfor være en degenerasjon på $2l+1$ tilstander.

58

Energivåer for bokspotensial

Orbital	Degenerasjon	Nukleoner
3p	6	138
1i	26	132
2f	14	106
3s	2	92
1h	22	90
2d	10	68
1g	18	58
2p	6	40
1f	14	34
2s	2	20
1d	10	18
1p	6	8
1s	2	2

59

Harmonisk oscillator

- Vi fikk ikke de korrekte magiske tallene ut av bokspotensiallet - det er for firkantet!
- Det er rimelig å tro at potensiallet ikke er veldig forskjellig fra tettheten i atomkjernen
 - Vi trenger et potensial som ligner på tetthetsfunksjonen:

$$\rho(r) = \frac{\rho_0}{1 + e^{\frac{r-R}{a}}}$$

- En matematisk enklere beskrivelse er potensiallet for en harmonisk oscillator:

$$V(r) = -V_0 + \frac{V_0}{R^2} r^2$$

60

Harmonisk oscillator - løsninger

Løsningen av Schrödinger-ligningen for harmonisk oscillator gir

$$E = (n_x + n_y + n_z + \frac{3}{2}) \hbar \omega_0 = (N + \frac{3}{2}) \hbar \omega_0$$

$$\text{der } N = n_x + n_y + n_z \text{ og } \omega_0 = \sqrt{\frac{2V_0}{mR^2}}$$

Angulærmomentet er som før: $L = \sqrt{l(l+1)} \hbar$

der $l = N, N-2, \dots, 1$ eller 0 .

61

Harmonisk oscillator - sfæriske koordinater

Igjen er det bedre å benytte sfæriske koordinater, kvantiseringen i r-retningen er da gitt ved kvantetallet n .

Sammenhengen mellom N og n er gitt ved: $N = 2(n - l) + 1$

Energien er da gitt ved:

$$E = [2(n - 1) + l] \hbar \omega_0 + \frac{3}{2} \hbar \omega_0$$

der $n = 1, 2, 3, \dots$

Vi husker at $E_{n,l} = E_{(n+1)(l-1)} = \dots = E_{(n+1)0}$ (det vil si at alle orbitaler der $2n+l$ er samme tall er degenerate)

62

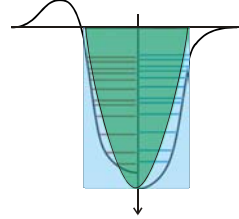
Harmonisk oscillator energinivåer

N	l=0	l=1	l=2	l=3	l=4	l=5	l=6	l=7
1	1s							
2		1p						
3	2s		1d					
4		2p		1f				
5	3s		2d		1g			
6		3p		2f		1h		
7	4s		3d		2g		1i	
8		4p		3f		2h		1j

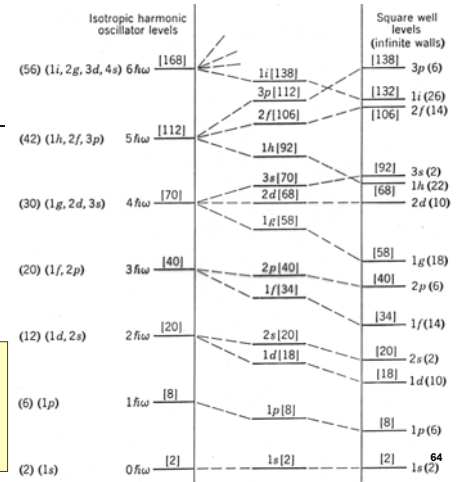
Tallene i den store ruten er n-quantetallet for sfæriske koordinater.

63

Oppsummering



De mer realistiske resultatene (i midten) er basert på Wood-Saxon potensialet (basert på tetthetsfunksjonen).



Hvor er de magiske tallene???

2, 8, 20, 28, 50, 82, 126 ?



65

Spinn-bane kobling

- Både partikkel i boks og harmonisk oscillator potensialene ga de tre første magiske tallene (2, 8 og 20).
- Høyere opp stemmer det ikke - det er en effekt vi har oversett:
 - ▶ Nukleonene har egenspin, $s = \frac{1}{2}$. Egenspinnet kan peke opp eller ned ($m_s = \pm \frac{1}{2}$).
 - ▶ Egenspinnet til **elektroner i atomorbitaler** er svært løst koblet til banespinnet og kan derfor sees bort i fra i første omgang.
 - ▶ Men dette er *ikke* tilfelle for nukleonene!

66

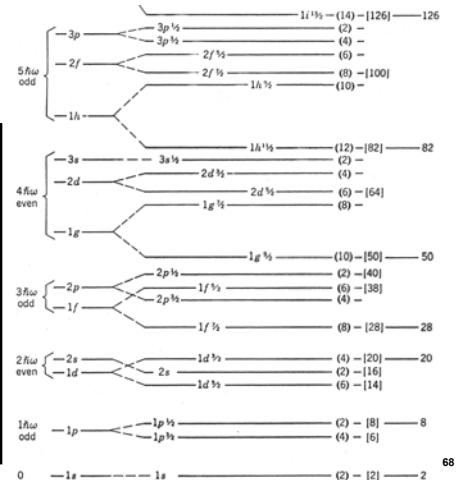
j-quantetallet

- Det viser seg at **egenspin** og **baneangulærmomentet** er koblet så sterkt sammen i atomkjernen at s og l-quantetallene ikke lenger er "gode quantetall".
 - ▶ Det betyr at nukleonets egenspin vv sterkt med nukleonets banespin.
- Vi må derfor legge sammen s og l angulærmomentene: $j = l + s$
- Quantetallet j er assosiert til j på samme måte som l er assosiert til baneangulærmomentet l .
- Slik som for l har vi projeksjonen m_j av j på z-aksen med tilhørende quantetall m_j .
- Effekten av denne sammenkoblingen er at tilstander som før var degenererte splittes opp -forskjellige j -quantetall gir forskjellige energier.

67

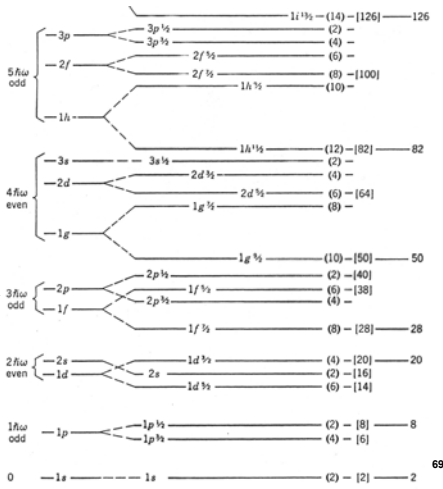
Skall-modell nivåskjema

- Ved å velge koblingskonstanten mellom s og l korrekt får vi gruppert orbitalene i samsvar med hva som er forventet!
- Merk notasjonen på orbitalene: $n l_j$ der vi bruker bokstaver for l-quantetallet.



68

Skall-modell nivåskjema



69

Bruk av skallmodellnivåskjemaet

- Skallmodellen slik som presentert her har vist seg å forutsi en lang rekke av egenskapene til atomkjernene.
- For eksempel forutsier den atomkjernenes spinn korrekt for en lang rekke kjerner.
 - ▶ For å forutsi spinn må man ta hensyn til at nukleoner, i motsetning til elektroner, parrer seg to og to: Dvs. at vi har en sterk vv mellom nukleoner av samme type som har samme n , l og j kvantetall, men motsatt m_j .
 - ▶ Siden spinn til parrede nukleoner er motsatt rettet, vil totalspinnet bli null.



Spinn til alle atomkjerner som har et like-tall antall nøytroner og protoner er null!

70

Først noen rettelser og klargjøringer...

- For r-retningen er det fordelmessig å benytte bølgefunksjonen $u(r) = r \cdot \psi(r)$ (ref. lysbilde nr. 50)
 - ▶ $p(r)dr \approx u^2 dr$ (sannsynlighet for å finne partikkelen mellom r og $r+dr$).
 - ▶ $\psi(r)$ får vi fra løsningen av Schrödinger ligningen.
- For angulærmomentkvantetallet $l = 0$ medfører ikke partikkelens bevegelse noe angulærmoment.
 - ▶ Det er her viktig å forstå at partikkelen fremdeles beveger seg, men ikke slik at det settes opp noe angulærmoment.

71

Oppsummering så langt

- Atomkjernen er bygget opp av **protoner** og **nøytroner** (fellesnavn nukleoner).
- Det virker **sterke krefter** mellom nukleonene, men de har meget **kort rekkevidde** - kun ca. en nukleondiameter.
- **Pauli's eksklusjonsprinsipp** hindrer nukleonene i å vekselvirke veldig ofte, vi kan derfor approksimere vv mellom alle nukleonene med et **fellespotensial**.
- For at fellespotensiallet skal være bindene må det være formet som en **brønn**.
 - ▶ Det mest realistiske potensiallet er basert på den målte tetthetsfordelingen av nukleoner i kjernen - det såkalte **Wood-Saxon potensiallet**.
 - ▶ Det er enklere å løse Schrödinger ligningen hvis vi bruker et **firkantboks-potensial** (for skarpt i kantene) eller **harmonisk-oscillator potensial** (for rundt i kantene).
- Ingen av disse tre potensiallene gir korrekte løsninger med hensyn til de **magiske tallene** (2, 8, 20, 28, 50, 82, 126).
- Først når vi tar hensyn til at **banespinn** og **egenspinn** er sterkt koblet sammen i atomkjernen får vi de forventede tallene. Vi må derfor innføre **totalangulærmomentvektoren j** , med det tilhørende kvantetallet j .

72

Det sammenkoblede spinn

$$\vec{j} = \vec{l} + \vec{s}$$

$$|\vec{j}| = \sqrt{j(j+1)}\hbar \quad \text{og} \quad j_z = m\hbar$$

der $m = -j, -j+1, \dots, j-1, j$; Til sammen $2j + 1$ verdier.

$$j = |l + s| = \begin{cases} l + 1/2 \\ l - 1/2 \end{cases}$$

For eksempel vil nukleoner i d-orbitaler ($l=2$) ha $j = 5/2$ eller $3/2$. Vi angir orbitalene slik: $d_{5/2}$ respektive $d_{3/2}$.

Om ønskelig kan vi angi hovedkvantetallet n også: $1d_{5/2}$.

73

Antall nukleoner i hvert j -nivå

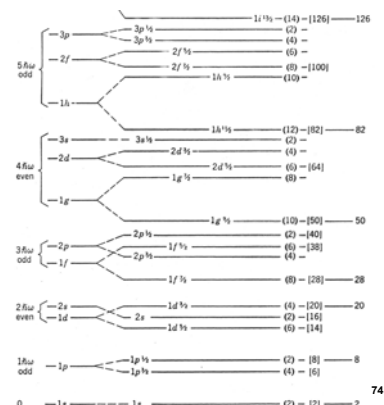
Antall nukleoner i hvert av de oppsplittede nivåene er $2j+1$!

Eksempel:

$1d_{3/2}$ har plass til $2 \cdot 3/2 + 1 = 4$ nukleoner.

Ett til:

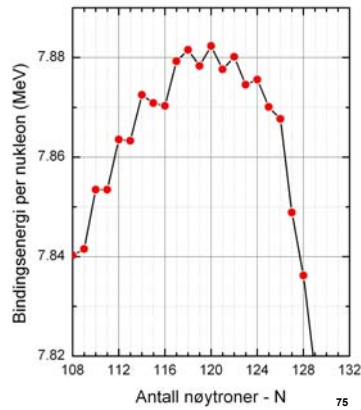
$1h_{9/2}$ har plass til $2 \cdot 9/2 + 1 = 10$ nukleoner.



74

Nukleonparring

- Nukleoner med samme n , l og j kvantetall, men med motsatt fortegn på m kvantetallet vil vekselvirke spesielt sterkt.
 - Den høye frekvensen av ν gjør at partiklene blir ekstra godt bundet sammen.
 - Derfor vil også den totale bindingsenergien bli høyere for atomkjernen som helhet.



Spinnet til odde-talls kjerner

- Vi fyller alltid opp nivåskjemaene (ett for nøytroner og ett for protoner) fra bunnen av og så langt vi har nukleoner.
 - Vi vil da få *grunntilstandskonfigurasjonen* for nukliden.
- Det uparrede nukleonet i en odde-talls kjerne vil bestemme kjernens spinn.

Eksempel: ^{13}C

^{13}C har 6 protoner og 7 nøytroner. Det uparrede nøytronet går inn i $1p_{1/2}$.

Målt spinn er som forventet lik $\frac{1}{2}$.