

# KJM 1060 - Radiokjemidelen

## Forelesning 3: Skallmodellen

46

### Partikkel i boks - en dimensjon

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

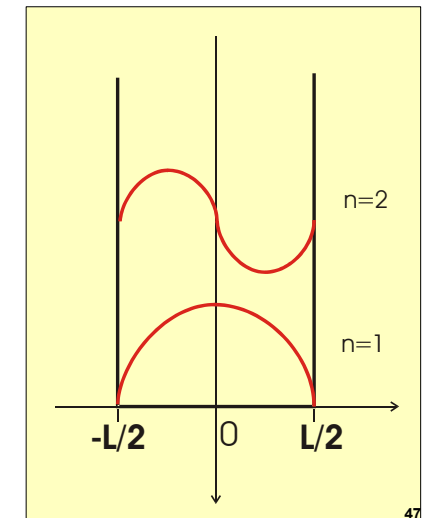
$$E_n = -V_0 + \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2mL^2}$$

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

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

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

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



47

### 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 ( $r$ ,  $\theta$  og  $\phi$ ).

48

### Partikkel i boks - $\theta$ -retningen

Bølgen i  $\theta$ -retningen må bestå av et heltallig antall bølgelengder per omdreining:

$$2\pi r = l \lambda_\theta = \frac{l h}{m v_\theta} = \frac{l h}{m \omega_\theta r}$$

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



Husk at  
 $\lambda = h / p = h / mv$   
 $v_\theta = \omega_\theta r$

49

## 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  $\theta$ -retningen fører til at **angulærmomentet også må være kvantisert**.
- En mer nøyaktig behandling gir at  $L = \sqrt{l(l+1)}\hbar$

50

## Partikkel i boks - r-retningen

- Også i r-retningen må bølgefunksjonen være en bølge.
- En mer hensiktsmessig funksjonen  $u(r)$  er  $u(r) = r\psi_r(r)$ 
  - $u(r)$  har egenskapen at  $p(r)dr$ , sannsynligheten 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  $\lambda = h / mv$ .

51

## Sentrifugalpotensialet

- Vi må ta hensyn til at bevegelsen i  $\theta$ -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

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

52

## Schrödinger ligningen for $u(r)$

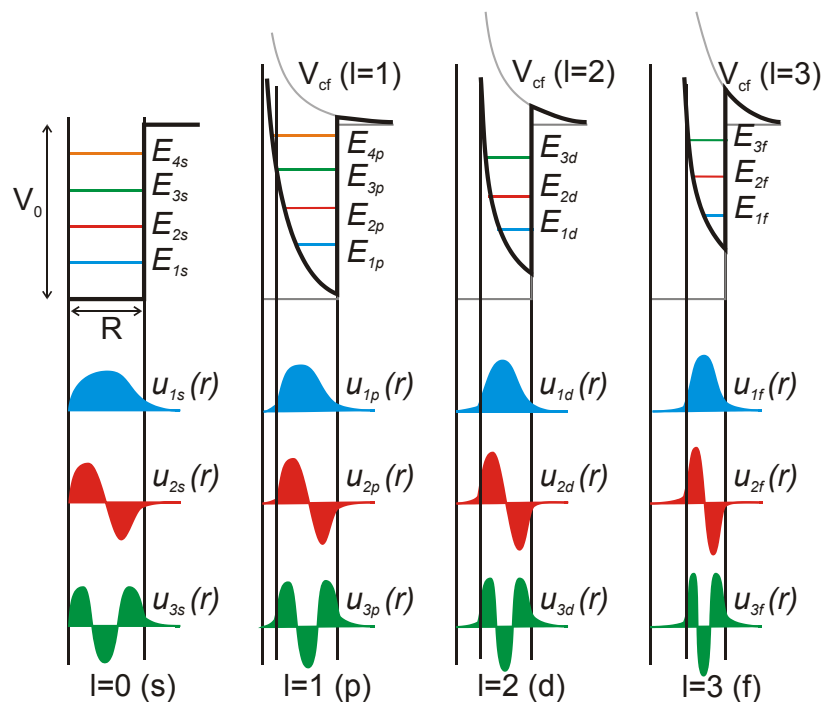
$$-\frac{\hbar}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi + V \psi = E \psi$$

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

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

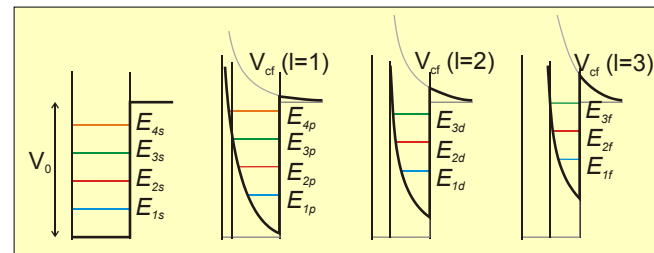
Vi ser at dette er samme likning som for den en-dimensjonale boksen, men at vi får et sett løsninger for hvert  $l$ -kvantetall.

53



54

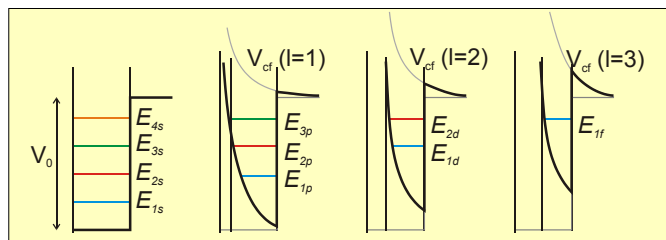
## Partikkel i tredimensjonal boks - konsekvenser



- 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.

55

## Partikkel i tredimensjonal boks - H-atomet



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

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

- 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  $E_{nl}$  som funksjon av  $l$  er mye mindre.

56

## Partikkel i boks - $\phi$ -retningen

- Som for  $\theta$ -retningen må bevegelsen i  $\phi$ -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  $\omega_\phi$  er  $\phi$ -komponenten av angulærmomentet.

57

## Partikkel i boks - $\phi$ -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

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

58

## Kvantetallet $m_l$

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

- Vi ser at angulærmomentet i  $\phi$ -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  $E_{n_l}$  vil det derfor være en degenerasjon på  $2l+1$  tilstander.

59

## 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

60

## 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 potensialet for en harmonisk oscillator:

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

61

## Harmonisk oscillator - løsninger

Løsningen av Schrödinger-ligningen for harmonisk oscillator gir

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

der  $N = n_x + n_y + n_z$  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  $0$ .

62

## 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:

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

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

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

63

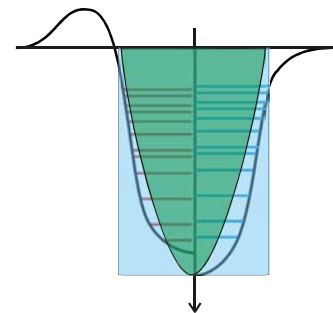
## Harmonisk oscillator energinivåer

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

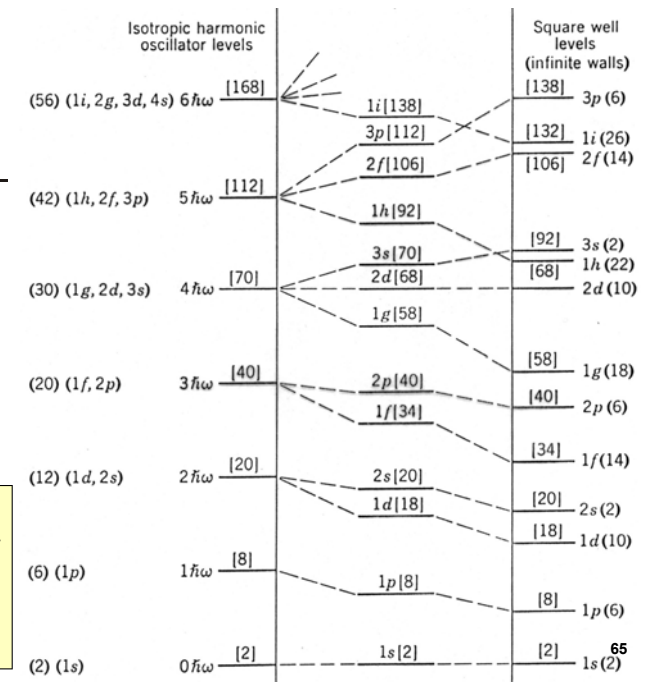
Tallene i den store ruten er n-quantetallet for sfæriske koordinater.

64

## Oppsummering



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



65

## Hvor er de magiske tallene???

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



66

## 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 banespinn og kan derfor sees bort i fra i første omgang.
  - ▶ Men dette er *ikke* tilfelle for nukleonene!

67

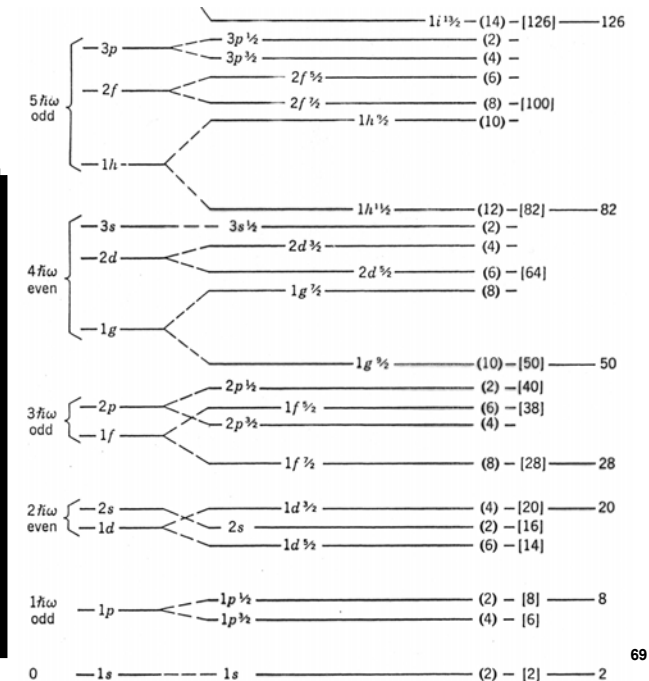
## j-quantetallet

- Det viser seg at *egenspin* og *baneangulærmomentet* er koblet så sterkt sammen i atomkjernen at  $s$  og  $l$  kvantetallene ikke lenger er "gode kvantetall".
  - ▶ Det betyr at nukleonets egenspin vv sterkt med nukleonets banespin.
- Vi må derfor legge sammen  $s$  og  $l$  angulærmomentene:  
 $j = l + s$
- Kvantetallet  $j$  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 kvantetall  $m_j$ .
- Effekten av denne sammenkoblingen er at tilstander som før var degenererte splittes opp -forskjellige  $j$ -kvantetall gir forskjellige energier.

68

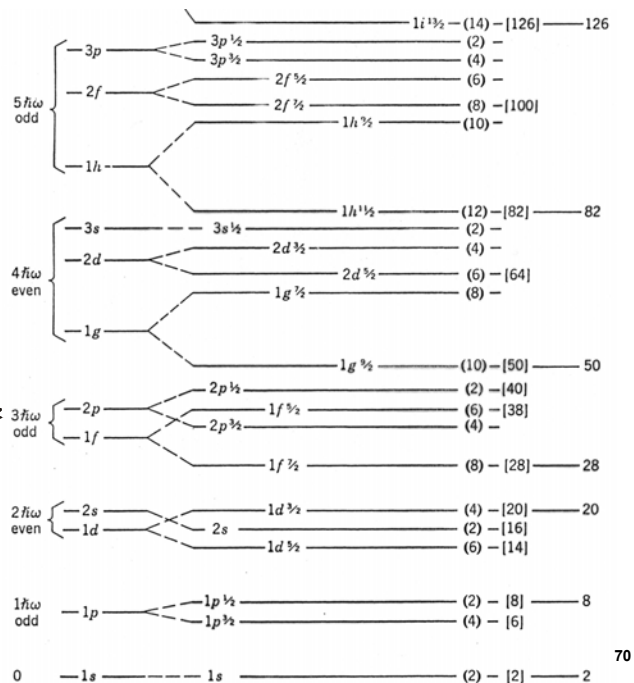
## Skall-modell nivåskjema

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



69

## Skall-modell nivå skjema



70

## Bruk av skallmodellnivå skjemaet

- 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, parer 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 totalspinn bli null.



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

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-oscillatort 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  $j$ .

73

## 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  $m = -j, -j+1, \dots, j-1, j$ ; Tilsammen  $2j + 1$  verdier.

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

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:  $1d_{5/2}$ .

74

## Antall nukleoner i hvert $j$ -nivå

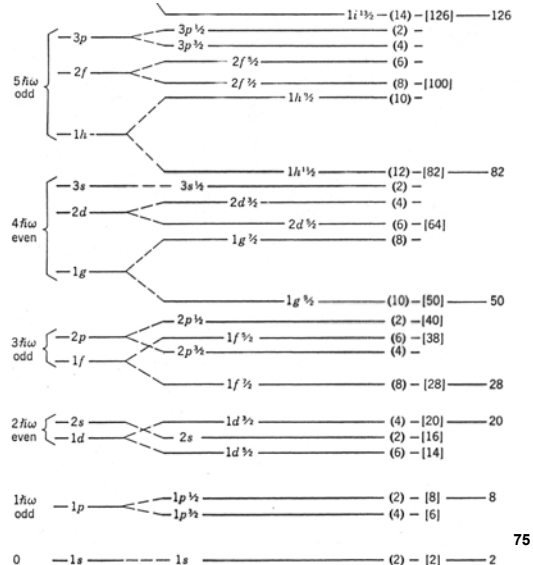
Antall nukleoner i hvert av de oppsplittede nivåene er  $2j+1$ !

Eksempel:

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

Ett til:

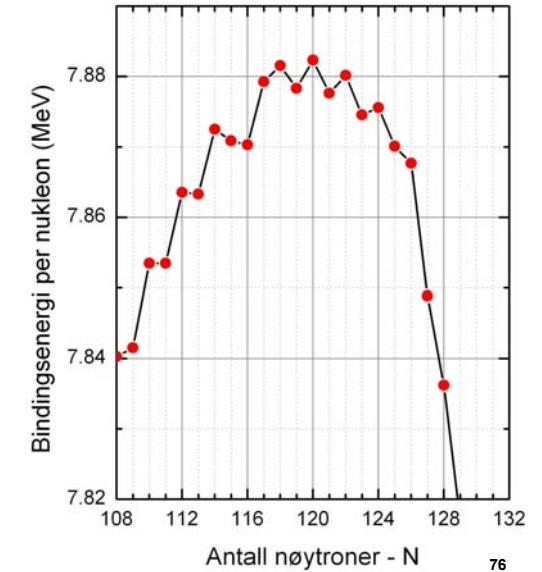
$1h_{9/2}$  har plass til  $2 \cdot 9/2 + 1 = 10$  nukleoner.



75

## Nukleonparring

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



76

## 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:  $^{13}\text{C}$

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

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

77