Is it possible to measure simultaneously absolute value of angular momentum |L| and its x projection? Why? Proof.

$$\left[\hat{L}_x,\hat{L}_y\right]=i\hbar\hat{L}_z\ ,\quad \left[\hat{L}_z,\hat{L}_x\right]=i\hbar\hat{L}_y\ ,\quad \left[\hat{L}_y,\hat{L}_z\right]=i\hbar\hat{L}_x\ .$$

Kuna operaatorid ei kommuteeru, siis pole neile vastavad füüsikalised suurused samaaegselt mõõdetavad. Täpselt saab mõõta ainult ühte impulssmomendi projektsiooni, näiteks z-teljele, ülejäänud kaks on aga sel juhul määramatud.

Osutub, et koos ühe projektsiooniga on mõõdetav ka impulssmomendi ruut ja seega ka impulssmoment ise.

$$\hat{\vec{L}}^2=\hat{L}_x^2+\hat{L}_y^2+\hat{L}_z^2 \qquad \left[\hat{\vec{L}}^2,\hat{L}_x\right]=\left[\hat{\vec{L}}^2,\hat{L}_y\right]=\left[\hat{\vec{L}}^2,\hat{L}_z\right]=0\ .$$

Kuna samaaegselt mõõdetavatel operaatoritel on ühised omafunktsioonid, tuleks meil impulsimomendi ruudu ja tema projektsioonde arvutamiseks lahendada järgmine omaväärtusülesanne

$$\hat{\vec{L}}^2\,Y=L^2\,Y\ ,\qquad \hat{L}_z\,Y=L_z\,Y\ .$$

$$\hat{\vec{L}}^2\,Y_{lm}=\hbar^2 l(l+1)Y_{lm}$$

$$\hat{L}_z\,Y_{lm}=\hbar m\,Y_{lm}\ ,$$

Sellel omaväärtusülesandel lahendid on kus impulsimomendi ruutu määraval kvantarvul l võivad olla väärtused $l=$ 0,1,2,... ja antud l korral võib impulsimomendi projektsiooni määraval kvantarvul m korral olla 2l+1 väärtust $m= l, l-1,\ldots,0,\ldots,-(l-1), l$

Nii impulsimoment kui ka selle projektsioon on diskreetne.Arvestades kvantarvule m lubatud väärtusi, on impulsimoment on suurem kui tema maksimaalne projektsioon

$$L^2=\hbar^2 l(l+1)>(L_z^2)_{\max}=\hbar^2 l^2$$

Nimetatud iseärasus võimaldab anda klassikalise pildi impulssmomendist kvantmehaanikas. Selleks kujutame impulsimomenti vektorina pikkusega $L = \ l(l + 1)$ ja oletame, et see pretsesseerib ühtlaselt z-telje ümber nii, et projektsioon z-teljele omab kogu aeg kindlat väärtust *m* . Selle järgi on impulssmomendi z-telje sihiline projektsioon täpselt määratud, projektsioonid x- ja y-teljele aga pidevalt muutuvad ja on seega määramata. Kuna L > $(L_z)_{max}$, siis sobib see pilt ka maksimaalse projektsiooni *l* korral.

How in quantum mechanics can be calculated the angle between the angular momentum vector $\vec{L}$ and the z-axis? Calculate the values of this angle for magnetic quantum numbers m=-2 and +1 for *3d* orbitals .

$$\cos\theta = \frac{L_z}{|\vec{L}|} = \frac{m\hbar}{\sqrt{l(l+1)}\hbar} = \frac{m}{\sqrt{l(l+1)}}$$

3d orbitaal: $l = 2$

Kui $m = -2$:

$$\cos\theta = \frac{-2}{\sqrt{6}} = -\frac{2}{\sqrt{6}} \Rightarrow \theta \approx \cos^{-1}\left(-\frac{2}{\sqrt{6}}\right) \approx 144.7^\circ$$

Kui $m = +1$:

$$\cos\theta = \frac{1}{\sqrt{6}} \Rightarrow \theta \approx \cos^{-1}\left(\frac{1}{\sqrt{6}}\right) \approx 65.9^\circ$$

What does the equation for the radial wave function look like if we assume that the electron is an uncharged particle?

Kui elektronil ei ole laengut, on potentsiaalne energia

$$U(r) = -\frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \cdot \frac{e^2}{r} = b \cdot \frac{e^2}{r} = 0$$

ja radiaalfunktsioon, mille kuju muidu on

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\Delta_r R(r) + (\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2Mr^2} - \frac{be^2}{r}) R(r) = E\,R(r)$$

saab kuju

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\Delta_r R(r) + \left(\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2Mr^2}\right) R(r) = ER(r)$$

How looks like the electron configuration for O, Al and Li atoms? Why?

Li(Z=3) $1s^2\ 2s^1$

Al(Z=13) $1s^2\ 2s^2\ 2p^6$ 3s2 3p1

O(Z=8) $1s^2\ 2s^2\ 2p^4$

Need põhinevad Aufbau printsiibil, mille alusel täidetakse madalama energiaga orbitaalid enne kõrgemaid.

Can you prove the following expression (page 127): "In the first order approximation of *λ* coefficient *a*1*n* must satisfy *a*1*n*+(*a*1*n*)*=0 ".

I järku häiritus:

$$\left(\hat{H}_0 - E_n^{(0)}\right)\psi_n^{(1)} = \left(E_n^{(1)} - \hat{H}'\right)\psi_n^{(0)}$$

Avaldame esimese järgu lainefunktsiooni:

$$\psi_n^{(1)} = \sum_{m\neq n} a_m^{(1)}\psi_m^{(0)}$$

Eeldame, et omaväärtusvõrrand baaslainefunktsioonidele:

$$\hat{H}_0\psi_m^{(0)} = E_m^{(0)}\psi_m^{(0)}$$

Asendame:

$$\sum a_m^{(1)}(E_m^{(0)} - E_n^{(0)})\psi_m^{(0)} = (E_n^{(1)} - \hat{H}')\psi_n^{(0)}$$

$$\sum_{m\neq n} a_m^{(1)}(E_m^{(0)} - E_n^{(0)})\delta_{km} = \int \psi_k^{(0)*}(E_n^{(1)} - \hat{H}')\psi_n^{(0)}\, dV$$

$$a_k^{(1)}(E_k^{(0)} - E_n^{(0)}) = E_n^{(1)}\delta_{kn} - H'_{kn} \quad \text{kus} \quad H'_{kn} = \int \psi_k^{(0)*}\hat{H}'\psi_n^{(0)}\, dV$$

Aga kui $k \neq n$, siis $\delta_{kn} = 0$:

$$a_k^{(1)} = \frac{H'_{kn}}{E_k^{(0)} - E_n^{(0)}}$$

Normaliseerimistingimus esimese järgu lähenduses:

$$\int \psi_n^* \psi_n\, dV = 1$$

$$\psi_n = \psi_n^{(0)} + \lambda\psi_n^{(1)} \quad (\lambda \ll 1)$$

Eeldades $\lambda = 1$, laieneb:

$$\int \left(\psi_n^{(0)} + \sum a_m^{(1)}\psi_m^{(0)}\right)^* \left(\psi_n^{(0)} + \sum a_k^{(1)}\psi_k^{(0)}\right) dV = 1$$

Säilitades ainult esimese järgu liikmed:

$$1 + \sum a_m^{(1)*} \int \psi_m^{(0)*}\psi_n^{(0)}\, dV + \sum a_k^{(1)} \int \psi_n^{(0)*}\psi_k^{(0)}\, dV = 1$$

Kuna $\int \psi_m^{(0)*}\psi_n^{(0)}\, dV = \delta_{mn}$, jääb:

$$a_n^{(1)*} + a_n^{(1)} = 0 \quad \Rightarrow \quad a_n^{(1)} \in i\mathbb{R}$$