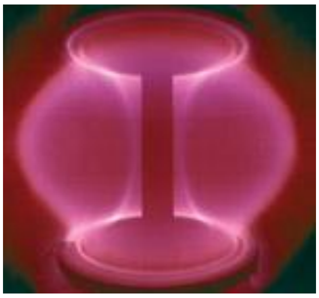
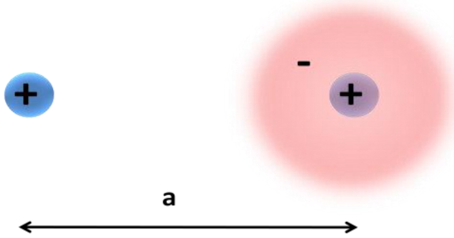
Projekt P: Störningsräkning för väteplasma: proton i närheten av väteatom.

När vätgas hettas upp till tillräckligt mycket formas ett plasma, se vänstra figuren nedan. I plasmat finns t.ex oladdade väteatomer men också fria, laddade elektroner och protoner. De fria elektronerna och protonerna bildas när elektroner ”slits bort” från vätekärnan, d.v.s. protonen. De elektroner som fortfarande är bundna till sina vätekärnor påverkas av de laddade, fria partiklarna. En effekt av denna påverkan är att både elektronernas tillgängliga energinivåer och deras vågfunktion ändras.





Höger figur: Väteplasma, 70 miljoner grader hett, Princeton Plasma Physics Laboratry. Vänster figur: Schematisk bild av en proton på avstånd *a* från en väteatom.

I projektet skall ni undersöka denna effekt genom att studera hur en elektron i det lägsta energitillståndet i en väteatom påverkas av en proton som befinner sig på ett visst avstånd från väteatomens kärna, se högra figuren ovan. Vi antar att påverkan på elektronen är liten och kan beräknas med första ordningens störningsteori.

Schrödingerekvationen för elektronen kan skrivas som

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\phi-\frac{\mathrm{e}^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{\mathrm{r}}\phi-\frac{\mathrm{e}^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}_\mathrm{p}|}\phi=\mathrm{E}\phi$$

där vätekärnan befinner sig i origo och protonen befinner sig på avstånd a utefter z-axeln, $\mathbf{r}_\mathrm{p}=\mathrm{a}\mathbf{e}_\mathrm{z}$.

a) Beräkna analytiskt, med hjälp av störningsteori, energiskiftet hos elektronen som befinner sig i det lägsta energitillståndet ϕ_{100} för väteatomen, d.v.s beräkna

$$\Delta E=\langle\phi_{100}|V_p\phi_{100}\rangle$$

där vi antar att effekten av protonens närvaro utgör en liten störning på elektronen i väteatomen, d.v.s

$$V_p=-\frac{\mathrm{e}^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}_\mathrm{p}|}$$

b) Plotta energiskiftet ΔE som funktion av a/a_0, där a_0 är Bohrradien. För vilka avstånd ger störningsräkningen rimliga resultat? Varför?

c) Inte bara elektronens energi påverkas av protonen utan också vågfunktionen. Man kan räkna ut en första ordningens störning av vågfunktionen $\Delta\phi_{100}$ med hjälp av formeln

$$\Delta\phi_{100}(\boldsymbol{r}) = \sum_{nlm\neq 100} \frac{\langle \phi_{nlm} | V_p \phi_{100} \rangle}{E_{100} - E_{nlm}} \phi_{nlm}(\boldsymbol{r})$$

där summan löper över alla möjliga kvanttillstånd. Låt oss här begränsa oss till att summera över 2s och 2p tillstånden, dvs nlm=200,21-1,210,211. Räkna ut, analytiskt (möjligt!) eller numeriskt, koefficienterna $\langle \phi_{nlm} | V_p \phi_{100} \rangle / (E_{100} - E_{nlm})$ och plotta dessa som funktion av a/a_0. För vilka värden på a/a_0 blir resultatet rimligt? Varför?

d) Plotta med hjälp av matlabs 3D-plotfunktioner (t.ex *isovalue*) sannolikhetstätheten i rummet för den den ostörda och den störda vågfunktionen samt skillnaden i sannolikhetstäthet för ett par representativa värden på a/a_0. Analysera resultatet, verkar det rimligt, vad hade ni förväntat er? Kan man förstå resultatet på något enkelt sätt? Vad tror ni är effekten av att man tar med ett begränsat antal termer i summan över elektrontillstånd ovan?