

ØVING 6

Oppgave 18 Grunntilstanden i hydrogenlignende atom

I denne oppgaven våger vi oss igjen ut i den tredimensjonale verden, og ser på et elektron med ladning $-e$ og masse m_e som beveger seg i feltet fra en ladning $+Ze$ som ligger fast i origo, altså en forenklet modell av et såkalt hydrogenlignende atom.¹ Potensialet (den potensielle energien) kan da skrives på formen

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} = -\frac{Z\hbar^2}{m_e a_0} \frac{1}{r}, \quad \text{der} \quad a_0 \equiv \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{m_e e^2} = 0.529 \text{ \AA} = 0.529 \cdot 10^{-10} \text{ m}.$$

Her er a_0 den såkalte **Bohr-radien**, som er et naturlig lengdemål i atomfysikk.

I Tillegg 1 og i øving 1 har vi sett på spesialtilfellet $Z = 1$, og fant da at dette systemet har en egenfunksjon (i realiteten grunntilstanden) på formen $\psi_1 = C_1 \exp(-r/a_0)$, med energien $E_1 = -\frac{1}{2}\alpha^2 m_e c^2$.

a. Det viser seg at den tilsvarende egenfunksjonen (også kalt en orbital) for $Z > 1$ har lignende form:

$$\psi = C e^{-r/a}.$$

Finn, ved å sette denne inn i egenverdiligningen, den korrekte verdien av a uttrykt ved a_0 og Z , og finn energieigenverdien E uttrykt ved E_1 og Z . Hint: Egenverdiligningen uttrykker generelt at $\widehat{H}\psi$ skal være lik $E\psi$, der E er en konstant, dvs uavhengig av r i dette tilfellet. Oppgitt: Laplace-operatoren i kulekoordinater:

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \left(\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \cot \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right).$$

(Se Rottmann.) Også oppgitt:

$$\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar c} \approx \frac{1}{137.036} \quad (\text{finstrukturkonstanten}); \quad 1 \text{ Rydberg} = \frac{\hbar^2}{2m_e c^2} = \frac{1}{2}\alpha^2 m_e c^2 \approx 13.6 \text{ eV}.$$

Beskriv med ord hvordan a og E "skaleres" som funksjoner av Z .

b. Hvor er sannsynlighetstettheten for å finne elektronet, $|\psi|^2$, størst? Avhenger bølgefunksjonen ψ av vinklene θ og ϕ ? Er det korrekt å si at tilstanden (orbitalen) er kulesymmetrisk med hensyn på origo? Hvordan er det med dreieimpulsen for denne tilstanden? Hint: Vis at energieigenfunksjonen $\psi(r)$ faktisk er en egenfunksjon også til operatoren $\widehat{\mathbf{L}}$, med en litt spesiell egenverdi. Merk at dreieimpulsoperatorene inneholder bare derivasjoner mhp vinklene. I kulekoordinater er nemlig dreieimpulsoperatoren

$$\begin{aligned} \widehat{\mathbf{L}} &= \mathbf{r} \times \widehat{\mathbf{p}} = \mathbf{r} \times \frac{\hbar}{i} \nabla \\ &= \frac{\hbar}{i} \left(\hat{\mathbf{e}}_\phi \frac{\partial}{\partial \theta} - \hat{\mathbf{e}}_\theta \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \right). \end{aligned}$$

¹I det *virkelige* hydrogenlignende atomet er både elektronet og kjernen med ladning Ze i bevegelse omkring tyngdepunktet. Men fordi protonet er 1836 ganger tyngre enn elektronet, og en kjerne er enda tyngre, gjør vi en liten feil ved å anta at kjernen ligger i ro. I ikke-relativistisk teori er det forøvrig lett å korrigere for denne feilen, ved å erstatte elektronmassen m_e i modellen ovenfor med den reduserte massen $\mu = \frac{m_e M}{m_e + M}$, der M er kjernemassen. Se "Oppsummering" side 111 i boka, og jf også oppgave 12A.

Hva er forventningsverdien av posisjonen, $\langle \mathbf{r} \rangle = \hat{\mathbf{e}}_x \langle x \rangle + \hat{\mathbf{e}}_y \langle y \rangle + \hat{\mathbf{e}}_z \langle z \rangle$, når sannsynlighetstettheten er kulesymmetrisk slik den er her? [Merk at $\langle \mathbf{r} \rangle$ er “tyngdepunktet” av sannsynlighetsfordelingen.]

c. I tillegg til sannsynlighetstettheten $|\psi|^2$ (her sannsynligheten pr volumenheter) er i slike problemstillinger den såkalte **radialtettheten** $P_{\text{rad}}(r)$ et viktig begrep.

Denne er definert slik at $P_{\text{rad}}(r)dr$ er sannsynligheten for å finne partikkelen i et kuleskall med radius r og tykkelse dr , dvs slik at radialtettheten $P_{\text{rad}}(r)$ er sannsynligheten “pr radius-enhet”, og slik at normeringsintegralet blir

$$\int_0^\infty P_{\text{rad}}(r)dr = 1.$$

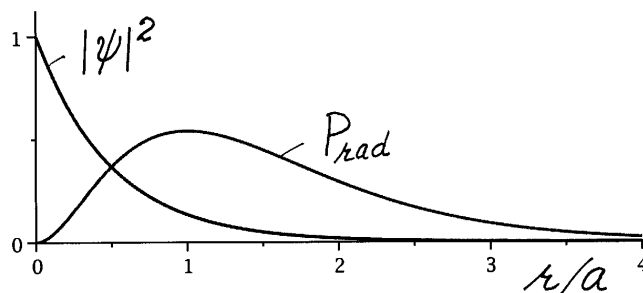
Finn radialtettheten for den aktuelle orbitalen, og vis at $C = (\pi a^3)^{-1/2}$ gir en normert bølgefunksjon ψ .^{2, 3} Hvor har *radialtettheten* sitt maksimum?

d. Mer interessant enn $\langle \mathbf{r} \rangle$ er nok forventningsverdien for elektronets avstand fra origo (kjernen),

$$\langle r \rangle = \int r |\psi|^2 d^3r = \int_0^\infty r P_{\text{rad}}(r)dr.$$

Beregn $\langle r \rangle$.

e. Hva er det klassisk tillatte området for elektronet i denne tilstanden (med energien $E = -\hbar^2/(2m_e a^2)$)? [Hint: Det klassisk tillatte området er der hvor potensialet er lavere enn energien.]



Figuren viser et diagram med sannsynlighetstettheten $|\psi|^2$ og radialtettheten $P_{\text{rad}}(r)$ (i vilkårlige enheter) som funksjoner av r/a . Hvilken av kurvene vil du bruke til å gjøre et overslag over sannsynligheten for å finne elektronet utenfor det klassisk tillatte området? Gjør et slikt overslag. (Se på kurven og bruk “snekkerskjønn”.)

²Ved beregninger som involverer hydrogenbølgefunksjoner er integralet $I_n(\alpha) \equiv \int_0^\infty x^n e^{-\alpha x} dx = n!/\alpha^{n+1}$ en gjenganger.

³I kulekoordinater er

$$d^3r = r^2 dr \sin \theta d\theta d\phi.$$

Ved integrasjon over hele vinkelrommet går polarvinkelen θ fra null til π , mens asimutvinkelen ϕ går fra null til 2π . Se avsnitt 5.2.g i Tillegg 5.

f. Vis at sannsynligheten for å finne elektronet utenfor en vilkårlig valgt radius r_0 er

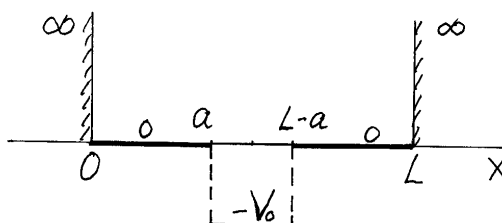
$$P_{r>r_0} = \left(2\frac{r_0^2}{a^2} + 2\frac{r_0}{a} + 1\right)e^{-2r_0/a}.$$

Hva blir *etter dette* sannsynligheten for å finne elektronet utenfor det klassisk tillatte området?

g. Hvordan skal vi definere **størrelse** og **form** av atomet i denne tilstanden? Har atomet noen “overflate” (som gjør at vi kan skille mellom “det indre av atomet” og omgivelsene)? Zumdahl innfører en definisjon av orbitalens overflate som en flate der $|\psi|^2$ er konstant, og slik at 90 prosent av sannsynligheten ligger innenfor denne flaten. Hva blir da formen og størrelsen av orbitalen i det aktuelle tilfellet? [Hint: Prøv deg fram på kalkulatoren, med utgangspunkt i resultatene ovenfor.]

Oppgave 19 Modifisert boks

La oss betrakte en partikkel med masse m som i utgangspunktet befinner seg i grunntilstanden i et bokspotensial $V(x)$ som er lik null for $0 < x < L$ og uendelig utenfor. I dette potensialet setter vi i gang med en “utgraving” av en brønn i midten, slik at $V = -V_0$ for $a < x < L - a$.



Her tenker vi oss V_0 holdt fast, slik at det er a som minker under utgravingen, fra $L/2$ i utgangspunktet og til slutt mot null. Under denne prosessen vil hvert av energinivåene være strengt avtagende når a minker, dvs mens vidden av brønnen i midten øker. Dette gjelder også for grunntilstanden ψ_1 , som vi skal fokusere på i denne oppgaven.

a. Finn ut hvor stor grunntilstandsenergien E_1 er for $a = L/2$, dvs før “utgravingen” starter. Anta at $V_0 = 16\hbar^2/(2mL^2)$, og finn så E_1 for $a = 0$, dvs etter at vi har “gravd ut” til dybden $-V_0$ over hele boksen.

b. Fra resultatene og det som er sagt ovenfor følger det at grunntilstandsenergien E_1 må være lik null for en viss a -verdi a_1 . Forklar kvalitativt hvordan grunntilstanden ψ_1 ser ut for dette tilfellet, og lag en prinsippskisse av den. [Hint: Siden potensialet hele tiden er symmetrisk med hensyn på “midtpunktet” $x = L/2$ av boksen, vil det samme gjelde for ψ_1 .]

c. Uansett hvor a ligger i intervallet $0 < a < L/2$ vil grunntilstanden ha formen $\psi_1 = A \cos[k_1(x - L/2)]$ i intervallet $a < x < L - a$. Forklar hvorfor. Hvor stort er bølgetallet k_1 for tilfellet $E_1 = 0$?

Forholdet a_1/L for dette tilfellet bestemmes av en betingelse som kan skrives på formen

$$k_1 L \frac{a_1}{L} \tan \left[k_1 L \left(\frac{1}{2} - \frac{a_1}{L} \right) \right] = \text{constant}.$$

Bruk kontinuiteten av ψ'_1/ψ_1 til å vise dette, og bestem ved dette konstanten på høyresiden. Det opplyses at a_1/L ligger mellom 0.33 og 0.35. Bruk kalkulatoren til å finne a_1/L med 3 siffrers nøyaktighet (ved å prøve deg fram noen ganger).