

FY6019 Moderne fysikk. Institutt for fysikk, NTNU. Våren 2015.
Løsningsforslag til øving 4.

Oppgave 1: Bundne tilstander i potensialbrønn

En potensialbrønn med dybde $V_0 = 300$ meV og bredde $L = 100$ Å har grunntilstand med energi $E_1 = 30$ meV.

a) Bestem partikkelens masse m .

[Kommentar: Elektroner i krystaller oppfører seg ofte som om de har en *effektiv masse* forskjellig fra verdien $m_e = 9.11 \cdot 10^{-31}$ kg. Det er vanlig å betegne slike effektive masser med m^* . Som regel er m^* mindre enn m_e .]

Fra forelesningene (s 60) har vi følgende ligning for bestemmelse av energien E_1 til grunntilstanden:

$$\tan\left(\frac{\sqrt{2mE_1}L}{2\hbar}\right) = \sqrt{\frac{V_0 - E_1}{E_1}}.$$

I denne oppgaven kjenner vi alle størrelser unntatt massen m , så vi må løse ligningen mhp m :

$$m = \frac{1}{2E_1} \left[\frac{2\hbar}{L} \arctan\left(\sqrt{\frac{V_0 - E_1}{E_1}}\right) \right]^2 = 7.17 \cdot 10^{-32} \text{ kg} = 0.079m_e.$$

b) Vis at antall bundne tilstander N for en partikkel med masse m i en potensialbrønn med dybde V_0 og bredde L er

$$N = 1 + \left\lfloor \frac{\sqrt{2mV_0}L}{\pi\hbar} \right\rfloor,$$

der klammeparentesene angir heltallsverdien av argumentet.

Se håndskrevet notat `antallbundne.pdf`.

c) Vis at $N = 3$ i det aktuelle tilfellet, og bestem energiene E_2 og E_3 til de to øvrige bundne tilstandene. Tips: Benytt gjerne programmet `qmwell_E1E2E3.py`.

I det aktuelle tilfellet har vi

$$\frac{\sqrt{2mV_0}L}{\pi\hbar} \simeq 2.5,$$

som har heltallsverdien 2. Dette gir $N = 1 + 2 = 3$. Ved å kjøre programmet `qmwell_E1E2E3.py` bestemmes energien til 1. og 2. eksiterte tilstand:

$$E_2 = 117 \text{ meV} \quad , \quad E_3 = 246 \text{ meV}.$$

(Programmet øker verdien av energien i små skritt og lokaliserer krysningspunkter mellom de ulike kurvene i figuren på side 60 i notatene.)

d) Bruk programmet `qmwell.py` til å løse TUSL numerisk for den aktuelle potensialbrønnen.

- Blir energiene til de tre bundne tilstandene de samme som du fant med programmet `qmwell_E1E2E3.py` i punkt c)?

I linje 56 i programmet skrives de 4 laveste energieigenverdiene ut, i enheten meV. Programmet beregner $E_1 = 30$ meV, $E_2 = 117$ meV og $E_3 = 246$ meV, det samme som vi fant med `qmwell_E1E2E3.py` (dvs analytisk). Tilstand nr 4 har energien $E_4 = 304$ meV, som er større enn $V_0 = 300$ meV. Dette er som ventet: Vi skal ha 3 bundne tilstander, dvs 3 tilstander med energi mindre enn potensialdybden V_0 . (Med uendelig bredde på intervallene på venstre og høyre side av brønnen blir det et kontinuerlig spektrum fra 300 meV og oppover. Her har vi *endelig* bredde på hver side ($3L$), slik at det blir diskrete energiverdier også over 300 meV.)

- Det utlagte programmet plotter bølgefunksjonen til de tre bundne tilstandene, samt den ”kontinuums-tilstanden” som har lavest energi. (Linje 61: `psi4 = v[:,3]`.) Hva slags symmetri (dvs symmetrisk eller antisymmetrisk) har de tre bundne tilstandene, og hvor mange nullpunkter har hver av dem?

Grunntilstanden: Blå kurve, symmetrisk, ingen nullpunkter.

1. eksiterte tilstand: Grønn kurve, antisymmetrisk, ett nullpunkt.

2. eksiterte tilstand: Rød kurve, symmetrisk, to nullpunkter.

- Bruk figuren til å anslå *inntrengningsdybden* $1/\kappa$ for hver av de tre bundne tilstandene. Sammenlign med de ”teoretiske” verdiene $\kappa_j^{-1} = \hbar/\sqrt{2m(V_0 - E_j)}$ ($j = 1, 2, 3$). (Tips: Fra høyre vegg, ved $z = 40$ nm, vil verdien av ψ_j reduseres med ca 63% over lengden $1/\kappa_j$, siden $\psi_j \sim \exp(-\kappa_j z)$.)

Forstørring av området fra $z = 40$ nm og oppover gir grunnlag for å anslå følgende inntrengningsdybder: Grunntilstanden: Verdi -0.03833 ved $z = 40$ nm. Reduksjon med $1/e$ gir verdien -0.01410, som vi har ved $z = 41.33$ nm. Gir anslått $1/\kappa = 1.33$ nm. Teoretisk verdi: $\hbar/\sqrt{2m(V_0 - E_1)} = 1.33$ nm.

1. eksiterte tilstand: Verdi 0.07382 ved $z = 40$ nm. Reduksjon med $1/e$ gir verdien 0.02716, som vi har ved $z = 41.63$ nm. Gir anslått $1/\kappa = 1.63$ nm. Teoretisk verdi: $\hbar/\sqrt{2m(V_0 - E_2)} = 1.62$ nm.

2. eksiterte tilstand: Verdi -0.09989 ved $z = 40$ nm. Reduksjon med $1/e$ gir verdien -0.03675, som vi har ved $z = 43.00$ nm. Gir anslått $1/\kappa = 3.00$ nm. Teoretisk verdi: $\hbar/\sqrt{2m(V_0 - E_3)} = 2.98$ nm.

Meget godt samsvar! (Kommentar: Slik potensialet tilordnes i programmet blir $V = 0$ fra og med $z = 30.0$ nm og til og med $z = 39.9$ nm, mens $V = -V_0 = -300$ meV i $z = 40.0$ nm. Dermed vil avleste tallverdier for ψ bli litt forskjellig fra mine verdier dersom $\psi(30$ nm) brukes som utgangspunkt. Men inntrengningsdybdene blir fortsatt som angitt her, med tre gjeldende siffer.)

- Endre på linjene 56 og 61 i programmet, slik at det skriver ut E_{10} og plotter $\psi_{10}(z)$. (NB: Husk at python nummererer slik at første element i lista er nr 0 osv, jf linje 58.) Bruk figuren til å anslå bølgelengden inni og utenfor brønnområdet, og sammenlign med de ”teoretiske” verdiene $2\pi/k$ (inni) og $2\pi/K$ (utenfor). Her er $k = \sqrt{2mE_{10}}/\hbar$ og $K = \sqrt{2m(E_{10} - V_0)}/\hbar$, som i forelesningene.

Utenfor er bølgelengden ut fra figuren 16.23 nm. I brønnområdet er bølgelengden ut fra figuren 7.12 nm. Programmet skriver ut at $E_{10} = 372$ meV, som betyr at

$$\begin{aligned} k &= \sqrt{2mE_{10}}/\hbar = 8.80 \cdot 10^8 \text{ m}^{-1}, \\ K &= \sqrt{2m(E_{10} - V_0)}/\hbar = 3.87 \cdot 10^8 \text{ m}^{-1}, \end{aligned}$$

som gir bølgelengder hhv $2\pi/k = 7.14$ nm og $2\pi/K = 16.23$ nm. Meget godt samsvar!

e) Bestem bølgelengden til utsendt ”lys” for de tre mulige elektronovergangene mellom kvantebrønnens bundne tilstander. (For elektromagnetiske bølger: $E = h\nu$, $c = \lambda\nu$.) I hvilken del av det elektromagnetiske spektret befinner vi oss?

Bølgelengden blir da $\lambda = c/\nu = ch/E = 2\pi\hbar c/E$, der E er energiforskjellen mellom to bundne tilstander. De tre mulige energiforskjellene er her 87 meV, 129 meV og 216 meV, som gir bølgelengder hhv 14.2, 9.6 og 5.7 μm . Dette er i det såkalt infrarøde området. (”Varmestraaling” – termisk energi $k_B T$ for et legeme med temperatur 310 K er til sammenligning ca 27 meV.)

Oppgave 2: Vibrasjoner i hydrogenmolekylet

Den effektive fjærkonstanten for vibrasjoner med liten amplitude i molekylet H_2 er $k \simeq 520 \text{ N/m}$. Bruk dette til å finne avstanden $\Delta E = \hbar\omega$ mellom vibrasjonsenerginivåene i H_2 . Omtrent hvor høy temperatur T må til for å eksitere H_2 fra laveste til nest laveste vibrasjonsnivå? (Tips: Tilgjengelig termisk energi ved temperatur T er omtrent $k_B T$, der $k_B = 1.38 \cdot 10^{-23} \text{ J/K}$ er Boltzmanns konstant.)

For en enkel harmonisk oscillator er $\omega = \sqrt{k/m}$. For et slik toatomig molekyl må vi passe på å sette m lik den reduserte massen, gitt ved $1/m = 1/m_1 + 1/m_2$. Her er $m_1 = m_2 = m_{\text{H}}$, slik at $m = m_{\text{H}}/2$. Dermed blir

$$\Delta E = \hbar\omega = \hbar\sqrt{2k/m_{\text{H}}} = 1.05 \cdot 10^{-34} \cdot \sqrt{2 \cdot 520 / 1.67 \cdot 10^{-27}} = 8.29 \cdot 10^{-20} \text{ J},$$

evt 0.528 eV . Setter vi dette lik termisk energi $k_B T$, tilsvarer det en absolutt temperatur $T = 8.29 \cdot 10^{-20} / 1.38 \cdot 10^{-23} \simeq 6000 \text{ K}$.

Kommentar: Dette er en svært høy temperatur, og for eksempel mye høyere enn såkalt romtemperatur, som vi typisk kan sette lik 300 K . Det betyr at i en hydrogen-gass, dvs en gass med H_2 -molekyler, vil praktisk talt alle molekylene befinne seg i grunntilstanden med hensyn på vibrasjonsbevegelsen. Og det vil typisk ikke "hjelp" å øke temperaturen; mer presist: Om vi øker temperaturen fra T til $T + \Delta T$, vil molekylene *fortsatt* befinne seg i vibrasjonsgrunntilstanden, med energien $\hbar\omega/2$ pr molekyl. Med andre ord, til tross for en liten temperaturøkning har gassens indre energi U ikke økt, når vi kun betrakter denne vibrasjonsbevegelsen: $\Delta U_{\text{vib}} = 0$. Men det må igjen bety at vibrasjonsbevegelsen ("vibrasjonsfrihetsgraden") ikke bidrar til *varmekapasiteten* ved normale temperaturer! (Husk, fra termodynamikken: $C_V = (\Delta Q / \Delta T)_V = \Delta U / \Delta T$ når vi holder volumet V konstant; her er ΔQ varmen som tas opp av systemet, dvs hydrogen-gassen.)) Dette er da også hva som observeres eksperimentelt, og det er en ren kvantemekanisk effekt. Se YF kapittel 18.4.

Oppgave 3: Diverse småoppgaver

a) Hva er den reduserte massen til molekylet HCl ? Enn Cl_2 ? Atommasser finner du i hukommelsen eller med google.

$$\begin{aligned}\tilde{m}_{\text{HCl}} &= \frac{m_{\text{H}}m_{\text{Cl}}}{m_{\text{H}} + m_{\text{Cl}}} = \frac{1.0 \cdot 35.5}{1.0 + 35.5} \text{ amu} = 0.97 \text{ amu} \\ \tilde{m}_{\text{Cl}_2} &= \frac{m_{\text{Cl}}m_{\text{Cl}}}{m_{\text{Cl}} + m_{\text{Cl}}} = \frac{35.5}{2} \text{ amu} = 17.3 \text{ amu}\end{aligned}$$

Her er $1 \text{ amu} = 1 \text{ atomic mass unit} = 1.67 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$.

b) Elektroner med kinetisk energi 0.15 eV sendes inn mot en potensialbarriere med konstant høyde $V_0 = 0.30 \text{ eV}$ og bredde $L = 10 \text{ \AA}$. Hvor stor andel av elektronene transmitteres gjennom barrieren? Hvor stor blir den transmitterte andelen dersom bredden økes til $40 \text{ \AA}$?

Uttrykket for transmisjonssannsynligheten T er gitt på side 65 i notatene:

$$T = \frac{4E(V_0 - E)}{4E(V_0 - E) + V_0^2 \sinh^2 \kappa L} = \frac{1}{1 + (V_0^2 / (4E(V_0 - E))) \sinh^2 \kappa L}.$$

Her er $\kappa = \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar$. Her er

$$\kappa = \sqrt{2 \cdot 9.11 \cdot 10^{-31} \cdot (0.30 - 0.15) \cdot 1.6 \cdot 10^{-19} / 1.05 \cdot 10^{-34}} = 1.99 \cdot 10^9 \text{ m}^{-1} = 0.199 \text{ \AA}^{-1},$$

slik at den dimensjonsløse faktoren κL blir 1.99 og 7.97 når L er hhv 10 Å og 40 Å. Faktoren $V_0^2/4E(V_0 - E)$ får her verdien 1, slik at

$$\begin{aligned} T(10 \text{ Å}) &= \frac{1}{1 + \sinh^2 1.99} \simeq 0.072 \\ T(40 \text{ Å}) &= \frac{1}{1 + \sinh^2 7.97} \simeq 4.8 \cdot 10^{-7} \end{aligned}$$

Vi ser at T avtar raskt (eksponentielt) med økende barrierebredde. (Hvis en ikke har funksjoner som $\sinh(x)$ og $\cosh(x)$ på kalkulatoren, kan en med god tilnærming sette $\sinh(x) \simeq \cosh(x) \simeq \exp(x)/2$ når x er en del større enn 1. Dette vil her gi $T = 0.070$ for den tynne barrieren, allerede en god tilnærming med $x = 1.99$, med andre ord.)

c) I en endimensjonal potensialboks (med $V = 0$ inni og $V = \infty$ utenfor) har sannsynlighetstettheten $|\psi|^2$ for eksiterte tilstander et eller flere null-*punkter*. På hva slags "geometriske objekter" har $|\psi|^2$ verdien null for eksiterte tilstander i hhv en todimensjonal og en tredimensjonal potensialboks?

I 2D: "Null-linjer", evt "nullkurver". I 3D: "Nullflater".

d) En kubisk bit (terning) av halvledermaterialet galliumarsenid (GaAs) med sidekanter 1 mm kan betraktes som en tredimensjonal potensialboks, i den forstand at noen av elektronene kan bevege seg omkring i materialet som frie partikler, med effektiv masse $m^* = 0.067m_e$ (der m_e er den "normale" elektronmassen). Hvor stor er energiforskjellen mellom grunntilstanden og 1. eksiterte nivå i en slik halvlederterning? Oppgi svaret i enheten peV. Hva må kvantetallene n_x , n_y og n_z omtrent være for at energien skal ligge 1 eV høyere enn grunntilstanden?

Energiniivåene i en kubisk boks med sidekanter L er (se s 69 i notatene)

$$E = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m^* L^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2),$$

med positive heltall for alle de tre kvantetallene. Energiforskjellen mellom grunntilstanden og 1. eksiterte nivå i *denne* kubiske boksen er dermed

$$\Delta E = \frac{3\hbar^2 \pi^2}{2m^* L^2} = 2.67 \cdot 10^{-30} \text{ J} = 16.7 \text{ peV}.$$

For å oppnå en energi på 1 eV må vi omtrent ha

$$n^2 = n_x^2 + n_y^2 + n_z^2 = \frac{2 \cdot 0.067 \cdot 9.11 \cdot 10^{-31} \cdot 0.001^2 \cdot 1.6 \cdot 10^{-19}}{(1.05 \cdot 10^{-34})^2 \cdot \pi^2} \simeq 1.8 \cdot 10^{11},$$

dvs $n \simeq 4.2 \cdot 10^5$. (Dette er tilsynelatende et stort tall, men dersom systemet inneholder mange elektroner, og vi tar hensyn til Pauli-prinsippet (maksimalt ett elektron i en gitt kvantetilstand), må vi nok regne med å finne elektroner i tilstander som tilsvarer energier på "noen elektronvolt".)

e) Tilstandstettheten $g(E)$, dvs antall tilstander pr energienhet, for partikler med masse m i en tredimensjonal boks med sidekanter L er gitt ved

$$g(E) = \frac{(2m)^{3/2} L^3 E^{1/2}}{4\hbar^3 \pi^2}.$$

Kontroller at uttrykket for $g(E)$ har riktig enhet. Bestem tallverdi for tilstandstettheten pr volumenhet, $g(E)/L^3$, for elektroner i GaAs med energi 0.5 eV. Oppgi svaret i SI-enheter. (Sett m lik den effektive massen m^* som er oppgitt i d.)

En tilstandstetthet, angitt som antall tilstander pr energienhet, må ha enheten $1/\text{J}$. La oss sjekke:

$$[g] = \frac{\text{kg}^{3/2} \text{m}^3 \text{J}^{1/2}}{\text{J}^3 \text{s}^3} = \frac{\text{J}^{3/2}}{\text{J}^{5/2}} = \frac{1}{\text{J}},$$

ettersom $\text{J} = \text{kg m}^2/\text{s}^2$. OK! Tilstandstetthet for elektroner pr volumenhet for elektroner med effektiv masse $0.067m_e$ i GaAs og med energi 0.5 eV:

$$g/L^3 = \frac{(2 \cdot 0.067 \cdot 9.11 \cdot 10^{-31})^{3/2} \cdot (0.5 \cdot 1.6 \cdot 10^{-19})^{1/2}}{4 \cdot (1.05 \cdot 10^{-34})^3 \cdot \pi^2} = 2.64 \cdot 10^{44} \text{ J}^{-1} \text{ m}^{-3}.$$

Et stort tall, men så er da også både 1 J et stort energiintervall og 1 m^3 et stort volum for slike systemer som det her er snakk om.

f) Den ϕ -avhengige delen av bølgefunksjonene som beskriver elektronet i hydrogenatomet, oppfyller ligningen

$$\frac{d^2\Phi}{d\phi^2} + m_l^2\Phi = 0.$$

Vis ved innsetting at løsningen er på formen $\Phi(\phi) = A \exp(im_l\phi)$ (der A er en ubestemt konstant). Dersom $\Phi(\phi)$ skal være entydig, må $\Phi(\phi + 2n\pi) = \Phi(\phi)$ for alle heltall n . Bruk dette til å vise at m_l må være heltallig.

To gangers derivasjon av den oppgitte løsningen og innsetting i ligningen gir

$$-m_l^2\Phi + m_l^2\Phi = 0,$$

som viser at dette *er* en løsning.

Fysisk er det ingen forskjell på vinklene ϕ , $\phi + 2\pi$, $\phi + 4\pi$ osv. Dermed må funksjonen Φ ha en og samme verdi for alle disse vinklene:

$$\exp(im_l\phi) = \exp(im_l(\phi + 2n\pi)) = \exp(im_l\phi) \exp(i \cdot m_l \cdot 2n\pi).$$

Følgelig må verdien av den siste eksponentialfunksjonen være lik 1 (for alle mulige heltallige n), og det er bare mulig dersom m_l er et helt tall.

g) Hva må hovedkvantetallet n minst være for at det skal være aktuelt å snakke om g -tilstander (dvs $l = 4$) i hydrogenatomet? Hvor mange ulike $4f$ -tilstander har vi i hydrogenatomet? (Dvs ulike *romlige* tilstander; vi ser bort fra elektronets *spinn* her.)

Siden l ikke kan være større enn $n - 1$, må n minst være lik 5 for at vi skal kunne ha $l = 4$. $4f$ -tilstander har $n = 4$ og $l = 3$. Da kan m_l ha verdiene $-3, -2, -1, 0, 1, 2, 3$. Følgelig er det 7 ulike $4f$ -tilstander i hydrogenatomet. (Tar vi hensyn til at elektronet i tillegg har spinn, med de to mulige verdiene $1/2$ og $-1/2$, blir det alt i alt 14 ulike $4f$ -tilstander.)

Oppgave 4: Harmonisk oscillator med python

Et elektron (masse m_e) befinner seg i et endimensjonalt harmonisk-oscillator-potensial

$$V(z) = \frac{1}{2}kz^2$$

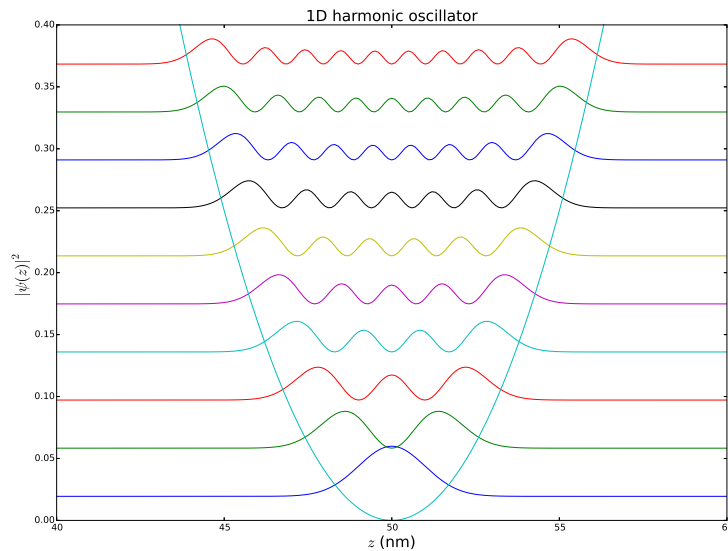
med fjærkonstant (krumning) $k = 3.2$ mN/m.

a) Bestem grunntilstandsenergien $E_0 = \hbar\omega/2$, og dermed samtlige energinivåer $E_n = (n + 1/2)\hbar\omega$ ($n = 0, 1, 2, \dots$). Oppgi E_0 i et helt antall meV.

$$E_0 = \frac{\hbar\omega}{2} = \frac{\hbar\sqrt{k/m_e}}{2} \simeq 19 \text{ meV}.$$

Avstanden mellom energinivåene blir ca 39 meV.

b) En utfordring: Benytt samme numeriske metode som i programmet `qmwell.py` til å bestemme de 10 laveste energinivåene $E_0, E_1, \dots, E_9$, og tilhørende bølgefunksjoner $\psi_0, \psi_1, \dots, \psi_9$. Resultatene skal illustreres i en figur som bør ligne på dette:



Figuren viser potensialet $V(z)$ i enheten eV, med nullpunkt i posisjon $z = 50$ nm. Videre plottes sannsynlighetstettheten $|\psi_n(z)|^2$ forskjøvet med verdien E_n målt i enheten eV. Dermed vil "nullnivået" for hver tilstand krysse $V(z)$ nøyaktig i overgangen mellom det klassisk tillatte ($E > V$) og det klassisk forbudte ($E < V$) området, slik at figuren gir en fin illustrasjon av hvordan de ulike bølgefunksjonene skifter fra oscillerende til eksponentielt avtagende oppførsel nettopp ved denne overgangen. Det er dessuten enkelt å telle antall nullpunkter for de ulike tilstandene, samt kontrollere at energinivåene er *ekvidistante*, dvs med konstant $\Delta E = E_n - E_{n-1}$. Du får noen tips på neste side.

Tips til oppgave 4b:

- Start med å ta en kopi av `qmwell.py`. Kall fila for eksempel `harmonisk.py`.
- Endre massen til elektronets normale masse.
- Legg inn områder med bredde 40 nm og konstant potensial $V_0 = 1$ eV på hver side av det harmoniske potensialet. Programlinjer som gjør jobben er

```
N = 100
```

```
V0 = 1.6E-19
```

```
V = [V0]*4*N + [V0*((n-N)/(N*1.0))**2 + [V0]*4*N
```

(I siste linje `N*1.0` for at python skal oppfatte $(n-N)/N$ som et reelt tall. Tar du bort `*1.0`, tar python heltallsverdien av $(n-N)/N$ dersom `n` og `N` er heltall.)

- Linjene over gir `V` enheten J. Ny liste med enheten eV oppnås med linjen
`VineV = [x/1.6E-19 for x in V]`
- Python tillater å addere en liste og et enkelt tall. Resultatet blir at det ene tallet adderes til hvert element i listen. Eksempel:

```
rho5 = np.abs(psi5)**2 + evalues[5]
```

Her blir `rho5` en liste med like mange elementer som listen `psi5`, og hvert element i `rho5` blir lik absoluttkvadratet av tilsvarende element i `psi5` pluss tallet `evalues[5]`.

- Plotting av flere grafer i samme figur gjøres ved å gjenta listen for horisontal akse for hver liste som skal visualiseres. For eksempel:

```
plt.plot(z,rho0,z,rho1,z,rho2,z,rho3,z,VineV)
```

plotter de 5 listene `rho0`, `rho1`, `rho2`, `rho3` og `VineV` som funksjon av `z` i samme figur. Her må antall elementer i alle lister være like.

- Aksegrenser innføres med `xlim` og `ylim`. For eksempel:

```
plt.xlim(40,60)
```

gir en figur med horisontal akse som starter på 40 og slutter på 60.

Et program som besvarer oppgaven, `harmosc.py`, er lagt ut på itslearning.

Oppgave 5: Radien til K -skallet i hydrogen

Grunntilstanden i hydrogenatomet beskrives med bølgefunksjonen

$$\psi_{1s}(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-r/a_0},$$

der $a_0 = 4\pi\epsilon_0\hbar^2/m_e e^2$ er Bohr-radien (ca 0.529 Å). Forventningsverdien av r ,

$$\langle r \rangle = \int r |\psi_{1s}(r)|^2 dV = \int_0^\infty r |\psi_{1s}(r)|^2 \cdot 4\pi r^2 dr$$

beregnes til $3a_0/2$ ved hjelp av delvis integrasjon (tre ganger). En alternativ måte å anslå radien til K -skallet på er å regne ut den inverse av forventningsverdien av $1/r$:

$$\left\langle \frac{1}{r} \right\rangle^{-1} = \left(\int \frac{1}{r} |\psi_{1s}(r)|^2 dV \right)^{-1}.$$

Dette blir litt enklere enn å regne ut $\langle r \rangle$, da det kun krever en gangs bruk av delvis integrasjon. Regn ut $\langle 1/r \rangle^{-1}$ og sammenlign med $\langle r \rangle$. Ingen av svarene kan vel sies å være "bedre" enn det andre. Skisser $\psi_{1s}(r)$ (for hånd, med python eller med geogebra) og merk av de to verdiene $\langle r \rangle$ og $\langle 1/r \rangle^{-1}$.

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{1}{r} \right\rangle^{-1} &= \left(\int \frac{1}{r} |\psi_{1s}(r)|^2 dV \right)^{-1} \\ &= \left(\int_0^\infty \frac{1}{r} \frac{1}{\pi a_0^3} e^{-2r/a_0} 4\pi r^2 dr \right)^{-1} \\ &= \frac{\pi a_0^3}{4\pi} \left(\int_0^\infty r e^{-2r/a_0} dr \right)^{-1} \end{aligned}$$

Delvis integrasjon, med $u = r$ og $v' = \exp(-2r/a_0)$, gir verdien $a_0^2/4$ for dette integralet. Dermed er

$$\left\langle \frac{1}{r} \right\rangle^{-1} = a_0,$$

noe mindre enn $\langle r \rangle$, som er $3a_0/2$. Figuren viser $\psi_{1s}(r)$, med de to forventningsverdiene $\langle r \rangle = 3a_0/2$ og $\langle 1/r \rangle^{-1} = a_0$ avmerket:

