Frist for innlevering: *???????????????? februar kl 17*

ØVING 6

Oppgave 6 − 1 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

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

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 energiegenverdien 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:

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

Beskriv med ord hvordan a og E "skalerer" 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 energiegenfunksjonen $\psi(r)$ faktisk er en egenfunksjon også til operatoren $\widehat{\mathbf{L}}$, med en

[1] I 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.

litt spesiell egenverdi. Merk at dreieimpulsoperatorene inneholder bare derivasjoner mhp vinklene. I kulekoordinater er nemlig dreieimpulsoperatoren

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

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

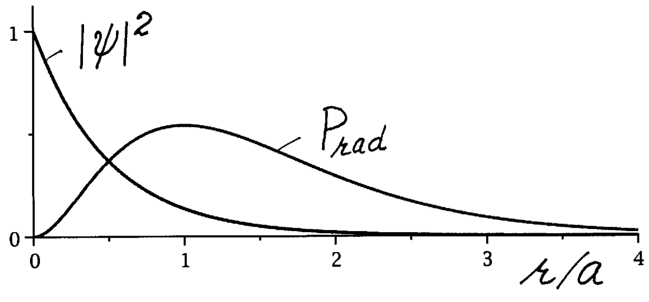
Finn radialtettheten for den aktuelle orbitalen, og vis at $C = (\pi a^3)^{-1/2}$ gir en normert bølgefunksjon ψ.[2, 3] Hvor har *radialtettheten* sitt maksimum?

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

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

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 områdetv er der hvor potensialet er lavere enn energien.]



[2] Ved 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.

[3] I kulekoordinater er

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

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.

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".)

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

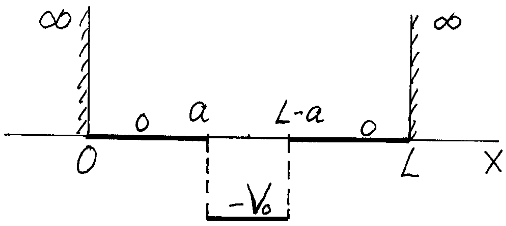
$$P_{r>r_0} = (2\frac{r_0^2}{a^2} + 2\frac{r_0}{a} + 1)e^{-2r_0/a}.$$

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 6 − 2 **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.]

<u>c.</u> 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 siffers nøyaktighet (ved å prøve deg fram noen ganger).