

Øving 9.

Oppgave 1

En av tilstandene (en $2p$ -tilstand) i hydrogenatomet er $\psi_{211} = R_{21}Y_{11}$. (Se formelark, bøker eller Tillegg 5.) Oppgavene 1 – 6 dreier seg om denne tilstanden.

Hva er de klassiske venderadiene (dvs indre og ytre grense for det klassisk tillatte området for elektronet)?

- A $(2 \pm \sqrt{2})a_0$
- B $(3 \pm \sqrt{2})a_0$
- C $(4 \pm \sqrt{2})a_0$
- D $(3 \pm 2\sqrt{2})a_0$
- E $(4 \pm 2\sqrt{2})a_0$

Oppgave 2

Hvor er sannsynlighetstettheten $\rho_{211} = |\psi_{211}|^2$ størst?

- A På z -aksen i $z = \pm a_0$
- B På z -aksen i $z = \pm 2a_0$
- C I xy -planet på en sirkel med radius a_0
- D I xy -planet på en sirkel med radius $2a_0$
- E I origo

Oppgave 3

Tilstanden ψ_{211} er egenfunksjon til paritetsoperatoren \hat{P} . Hva er tilhørende egenverdi?

- A -2
- B -1
- C 0
- D 1
- E 2

Oppgave 4

Hvor (i det klassisk tillatte området) er sannsynlighetstettheten ρ_{211} lik null?

- A På z -aksen
- B På y -aksen
- C På x -aksen
- D I xy -planet
- E Ingen steder

Oppgave 5

Radialtettheten $u_{21}^2 = (R_{21} r)^2$ er størst i ...

A origo

B $r = a_0$

C $r = 2a_0$

D $r = 4a_0$

E $r = 8a_0$

Oppgave 6

Dersom elektronet er eksitert til tilstander med hovedkvantetall $n = 3$, kan atomet emitte et foton slik at elektronet havner i tilstanden ψ_{211} . Fra hvor mange (romlige) tilstander med $n = 3$ er en slik overgang mulig, når utvalsreglene $\Delta l = \pm 1$ og $\Delta m = 0, \pm 1$ skal oppfylles?

A 1

B 2

C 3

D 4

E 5

OPPGAVE 20 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

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

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

I Tillegg 1 og i en tidligere øving 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 $\hat{H}\psi$ skal være lik $E\psi$, der E er en konstant, dvs uavhengig av r i dette tilfellet. Oppgitt: Laplace-operatoren i kulekoordinater:

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

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.

(Se Rottmann.) Også oppgitt:

$$\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar c} \approx \frac{1}{137.036} \quad (\text{finstrukturkonstanten}); \quad 1 \text{ Rydberg} = \hbar^2/2m_e a_0^2 = \frac{1}{2}\alpha^2 m_e c^2 \approx 13.6 \text{ eV}.$$

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 energiegenfunksjonen $\psi(r)$ faktisk er en egenfunksjon også til operatoren $\hat{\mathbf{L}}$, med en litt spesiell egenverdi. Merk at dreieimpulsoperatorene inneholder bare derivasjoner mhp vinklene. I kulekoordinater er nemlig dreieimpulsoperatoren

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

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),

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

Beregn $\langle r \rangle$.

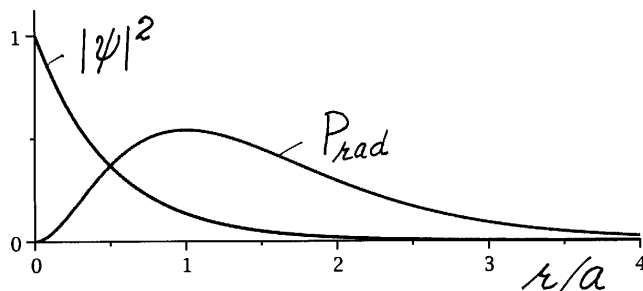
²Ved beregninger som involverer hydrogenbølgefunksjoner er integralet $I_n(\alpha) \equiv \int_0^\infty x^n e^{-\alpha x} dx = n!/\alpha^{n+1}$ en gjenganger.

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.

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 radiale tettheten $P_{rad}(r)$ (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 21 Litt mer om den hydrogenlignende grunntilstanden

Vi må bli enda litt bedre kjent med grunntilstanden for det hydrogenlignende systemet [et elektron i Coulomb-potensialet $V(r) = -Ze^2/(4\pi\epsilon_0 r) = -Z\hbar^2/(m_e a_0 r)$] som vi så på i OPPGAVE 16. Her hadde den normerte grunntilstanden formen

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \psi(r)e^{-iEt/\hbar}, \quad \psi_a(r) = (\pi a^3)^{-1/2} e^{-r/a}.$$

Vi har sett at $\langle \mathbf{r} \rangle = 0$ for denne tilstanden, og fra Ehrenfests teorem, $\langle \mathbf{p} \rangle_\Psi = m \frac{d}{dt} \langle \mathbf{r} \rangle_\Psi$, følger det da at $\langle \mathbf{p} \rangle = 0$. (Husk at forventningsverdien $\langle \mathbf{r} \rangle$ er tidsuavhengig for *alle* stasjonære bundne tilstander, så $\langle \mathbf{p} \rangle$ er lik null for alle slike.)

Dette betyr likevel ikke at elektronet er i ro. Ut fra sannsynlighetsfordelingen $|\psi(r)|^2$ kan vi anslå usikkerheten Δx til å være av størrelsesorden a . Fra uskarphetsrelasjonen følger det da at $(\Delta p_x)^2 = \langle p_x^2 \rangle$ er nødt til å være ganske betydelig (og tilsvarende for Δp_y og Δp_z). Denne “kvantevillskapen” kan vi beregne nøyaktig:

a. Bruk relasjonen $\int (\hat{F}\Psi_1)^* \Psi_2 d\tau = \int \Psi_1^* \hat{F}\Psi_2 d\tau$ for en hermiteske operator \hat{F} og sjekk at følgende regnestykke er korrekt:

$$\begin{aligned} \int \Psi^* (\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2) \Psi d^3r &= \int [(\hat{p}_x \Psi)^* (\hat{p}_x \Psi) + (\hat{p}_y \Psi)^* (\hat{p}_y \Psi) + (\hat{p}_z \Psi)^* (\hat{p}_z \Psi)] d^3r \\ &= \int (\hat{\mathbf{p}} \Psi)^* \cdot (\hat{\mathbf{p}} \Psi) d^3r \\ &= \int |\hat{\mathbf{p}} \Psi|^2 d^3r. \end{aligned}$$

Sjekk at dette gir de generelle formlene

$$\langle \mathbf{p}^2 \rangle_{\Psi} = \hbar^2 \int |\nabla \Psi|^2 d^3r \quad \text{og} \quad \langle K \rangle_{\Psi} = \frac{\hbar^2}{2m} \int |\nabla \Psi|^2 d^3r.$$

Her kan du legge merke til at forventningsverdien av den kinetiske energien bestemmes av gradienten til Ψ ; jo mer variasjon i bølgefunksjonen, desto større er $\langle \mathbf{p}^2 \rangle$ og $\langle K \rangle$ (et viktig poeng; ikke glem dette).

b. For den aktuelle kulesymmetriske tilstanden $\psi(r)$ finner du (vha gradientoperatoren i kulekoordinater) at $\nabla \psi = \hat{\mathbf{e}}_r \partial \psi / \partial r$ er proporsjonal med ψ . Dermed blir integralet for $\langle \mathbf{p}^2 \rangle$ essensielt normeringsintegralet. Bruk dette til å vise at

$$\langle \mathbf{p}^2 \rangle_a = \hbar^2 / a^2.$$

I OPPGAVE 16 fant vi at “radien” for grunntilstandsorbitalen er

$$a = \frac{a_0}{Z}; \quad a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{m_e e^2} \approx 0.529 \cdot 10^{-10} \text{ m.}$$

Fra disse resultatene kan vi beregne en “rms”-hastighet for elektronet; $v_{rms} \equiv \sqrt{\langle \mathbf{p}^2 \rangle} / m_e$. Vis at denne hastigheten er lik $Z\alpha c$, der $\alpha \equiv e^2 / (4\pi\epsilon_0 \hbar c) \approx 1/137$ er finstrukturkonstanten, og c er lyshastigheten. Dette skulle gi et begrep om elektronets bevegelse i grunntilstanden.

c. Bruk resultatet ovenfor til å vise at forventningsverdien av den kinetiske energien er

$$\langle K \rangle_a = -E = \frac{\hbar^2}{2m_e a^2} = Z^2 \frac{\hbar^2}{2m_e a_0^2} \approx 13.6 \text{ eV} \cdot Z^2,$$

der E er grunntilstandsenergien som vi fant i OPPGAVE 16. Beregn også forventningsverdien av $1/r$ uttrykt ved a ,⁴ og vis at forventningsverdien av den potensielle energien kommer ut som $\langle V \rangle_a = 2E$.

OPPGAVE 22 Begynnelsestilstand $\psi_a(r) = (\pi a^3)^{-1/2} \exp(-r/a)$ (nå med $Z = 1$)

For $Z = 1$ er “radien” og grunntilstanden for atomet ovenfor

$$a = a_0 \quad \text{og} \quad \psi_{a_0} = (\pi a_0^3)^{-1/2} \exp(-r/a_0).$$

Grunntilstanden er pr definisjon tilstanden med lavest mulig energi. Hvorfor kan ikke elektronet avgir noe av denne energien og “falle enda nærmere inn mot den tiltrekkende plussladningen i origo”? (Jf satellitten som avgir noe energi pga friksjon mot luftmolekyler, og dermed kommer nærmere jorda, med stadig lavere energi. Husk også at dette var det fundamentale spørsmålet som både Bohr og Schrödinger måtte stille seg.)

Det mest “autoritative” svaret ligger selvsagt i egenverdiligningen $\widehat{H}\psi = E\psi$. (Vi skal senere se at denne ikke tillater lavere energieigenverdier enn den vi fant i OPPGAVE 16. Så den aktuelle tilstanden er virkelig grunntilstanden.) Men det er også instruktivt å prøve andre innfallsvinkler:

Det er fullt mulig å tvinge (“skvise”) dette systemet inn i en (begynnelses-)tilstand beskrevet ved en bølgefunksjon som er lokalisert nærmere origo, ved et gitt tidspunkt. En slik bølgefunksjon beskriver

⁴Det er et poeng å finne disse størrelsene uttrykt ved a . I neste oppgave skal vi nemlig bruke samme bølgefunksjon ψ_a som her, men da kommer vi til å tenke oss a som en parameter som kan varieres.

ikke en energiegentilstand, men vi kan selvsagt fortsatt beregne forventningsverdier i denne begynnelsestilstanden, både av potensiell og kinetisk energi, og dermed av den totale energien $E = K + V$. Den *potensielle* energien blir da lavere (mer negativ) enn for egentilstanden $\psi_{a_0(r)}$. Anta f.eks at vi for $t = 0$ “skviser” systemet inn i en tilstand som svarer til den normerte bølgefunksjonen $\psi_a(r) = (\pi a^3)^{-1/2} \exp(-r/a)$, der a nå betraktes som en fritt valgbar parameter, som godt kan være mindre enn a_0 . ($a < a_0$ betyr at tilstanden ψ_a er “skviset” i forhold til grunntilstanden ψ_{a_0} ; velger vi derimot $a > a_0$, kan vi si at tilstanden er “strukket” i forhold til grunntilstanden.)

a. Fra resultatene i forrige oppgave finner vi (med $Z = 1$) at

$$\langle V \rangle_a = -\frac{\hbar^2}{m_e a_0} \left\langle \frac{1}{r} \right\rangle = -\frac{\hbar^2}{2m_e a_0^2} \frac{2a_0}{a} \approx -27.2 \text{ eV} \cdot \frac{a_0}{a}.$$

Her ser vi at $\langle V \rangle_a$ ganske riktig blir lavere (mer negativ) jo mindre a vi velger (dvs jo hardere vi “skviser” tilstanden ved $t = 0$). Så det går alltid an å preparere en tilstand der elektronet befinner seg nærmere plussladningen i origo, med lavere *potensiell* energi enn for grunntilstanden.

Hovedpoenget med denne oppgaven er å få fram at en slik skviset begynnelsestilstand ($\psi_a(r)$ med $a < a_0$) medfører økt kvantevillskap! Vårt mål for kvantevillskapsen er forventningsverdien av den kinetiske energien. Vis fra resultatene i forrige oppgave at

$$\langle K \rangle_a = \langle K \rangle_{a_0} \cdot \frac{a_0^2}{a^2} \approx 13.6 \text{ eV} \cdot \frac{a_0^2}{a^2}.$$

Hva blir da tallverdiene for $\langle V \rangle_a$, $\langle K \rangle_a$ og $\langle E \rangle_a$ om du velger en begynnelsestilstand med halvparten så stor utstrekning som grunntilstanden, dvs $a = a_0/2$? Hva blir $\langle E \rangle_a$ om du “strekker” begynnelsestilstanden, ved å velge $a = 2a_0$?

b. Deriver uttrykket for $\langle E \rangle_a = \langle K + V \rangle_a$ med hensyn på a og påvis at $\langle E \rangle_a$ faktisk har et minimum for $a = a_0$. Er du nå med på at det på et vis er kvantevillskapsen som hindrer dette atomet (og andre atomer, og molekyler) i å kollapse, ved at elektronene “detter” inn mot kjernene?