Frist for innlevering: *Tirsdag 10. mars kl 17*

ØVING 6

Oppgåve 1 Grunntilstanden i hydrogenliknande atom

I denne oppgåva skal vi studere eit elektron med ladning $-e$ og masse m_e som bevegar seg i feltet frå ei ladning $+Ze$ som ligg i ro i origo, altså ein forenkla modell av eit såkalla hydrogenliknande atom [1]. Potensialet eller den potensielle energien kan då skrivast på forma

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

Her er a_0 **Bohr-radien**, som er eit naturlig lengdemål i atomfysikk.

I Tillegg 1 og i øving 1 har vi sett på spesialtilfellet $Z = 1$, og fann at dette systemet har ein eigenfunksjon på forma $\psi_1 = C_1 \exp(-r/a_0)$, med energien $E_1 = -\frac{1}{2}\alpha^2 m_e c^2$.

a) Det viser seg at den tilsvarende eigenfunksjonen (også kalla ein orbital) for $Z > 1$ har same form:

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

Finn ved innsetting i eigenverdilikninga den korrekte verdien av a uttrykt ved a_0 og Z, og finn energieigenverdien E uttrykt ved E_1 og Z. Hint: Eigenverdilikninga uttrykker generelt at $\hat{H}\psi$ skal vere lik $E\psi$, der E er ein konstant, dvs uavhengig av r. Oppgjeve: Laplace-operatoren i kulekoordinatar:

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

og

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

Forklar korleis a og E skalerer som funksjonar av Z.

b) Kor er sannsynlegheitstettheiten for å finne elektronet, $|\psi|^2$, størst? Er bølgjefunksjonen ψ avhengig av vinklane θ og ϕ? Er det korrekt å seie at tilstanden (orbitalen) er kulesymmetrisk med omsyn på origo? Korleis er det med dreieimpulsen for denne tilstanden? Hint: Vis at energieigenfunksjonen $\psi(r)$ og er en eigenfunksjon til operatoren $\hat{\mathbf{L}}$, med ein litt spesiell eigenverdi. Merk at dreieimpulsoperatorane inneheld berre derivasjoner mop vinklane. I kulekoordinatar er nemleg dreieimpulsoperatoren

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

[1] I det *verkelige* hydrogenliknande atomet bevegar både elektronet og kjerna med ladning Ze seg rundt tyngdepunktet. Men fordi protonet er 1836 gonger tyngre enn elektronet, og ei kjerne er enda tyngre, er det berre ein liten feil å anta at kjerna ligg i ro. I ikkje-relativistisk teori er det forøvrig lett å korrigere for denne feilen ved å erstatte elektronmassen m_e i modellen ovanfor med den reduserte massen $\mu = \frac{m_e M}{m_e+M}$, der M er kjernemassen. Sjå Oppsummering side 111 i boka.

Kva er forventningsverdien til 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 sannsynlegheitstettheiten er kulesymmetrisk slik den er her? [Merk at $\langle\, \mathbf{r} \,\rangle$ er tyngdepunktet av sannsynlegheitsfordelinga.]

c) I tillegg til sannsynlegheitstettheiten er $|\psi|^2$ (her sannsynlegheiten pr volumeining) i dette tilfellet den såkalla **radialtettheiten** $P_{\rm rad}(r)$ viktig:

> $P_{\rm rad}(r)dr$ er sannsynlegheiten for å finne partikkelen i eit kuleskall med indre radius r og ytre radius $r{+}dr$. Altså er radialtettheiten $P_{\rm rad}(r)$ er sannsynlegheiten "pr radius-eining", og slik at normeringsintegralet blir
>
> $$\int_0^\infty P_{\rm rad}(r)dr = 1.$$

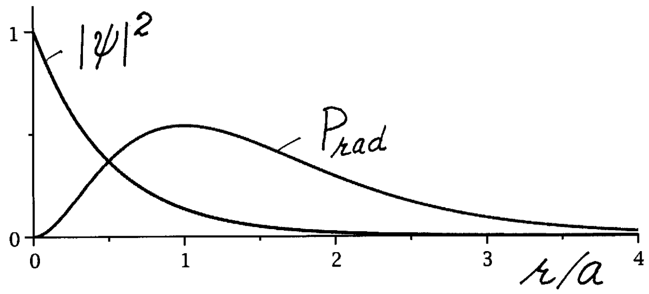
Finn radialtettheiten for den aktuelle orbitalen, og vis at $C = (\pi a^3)^{-1/2}$ gjev ein normert bølgjefunksjon ψ.[2] [3] Kor er *radialtettheiten* maksimal?

d) Meir interessant enn $\langle\, \mathbf{r} \,\rangle$ er kanskje forventningsverdien $\langle r \rangle$. Dette er elektronets midlere avstand frå kjerna og gjeve ved

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

Rekn ut$\langle\, r \,\rangle$.

e) Kva er det klassisk tillatne området for elektronet i denne tilstanden (med energien $E = -\hbar^2/(2m_e a^2)$)?



Figuren viser eit diagram med sannsynlegheitstettheiten $|\psi|^2$ og radialtettheiten $P_{\rm rad}(r)$ (i vilkårlege einingar) som funksjonar av r/a. Kva kurve vil du bruke for å gjere eit estimat for sannsynlegheiten for å finne elektronet utafor det klassiske området?

f) Vis at sannsynlegheiten for å finne elektronet utafor ein vilkårleg radius r_0 er

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

[2] Når vi studerer hydrogenbølgjefunksjonar er integralet $I_n(\alpha) \equiv \int_0^\infty x^n e^{-\alpha x} dx = n!/\alpha^{n+1}$ ein gjengangar.

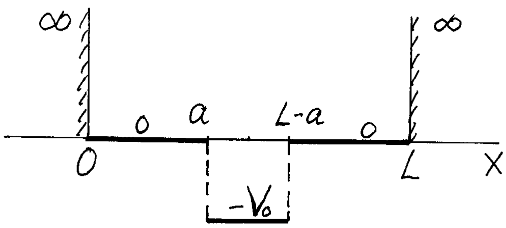
[3] I kulekoordinatar er $d^3r = r^2 dr \, \sin\theta \, d\theta \, d\phi$. Ved integrasjon over heile vinkelrommet går polarvinkelen θ frå null til π, medan asimutvinkelen ϕ går frå null til 2π.

Kva blir *etter dette* sannsynlegheiten for å finne elektronet utafor det klassisk tillatne området?

g) Korleis skal vi definere **storleik** og **form** på atomet i denne tilstanden? Har atomet ei "overflate"? Zumdahl innfører ein definisjon av orbitalens overflate som ei flate der $|\psi|^2$ er konstant, og slik at 90 prosent av sannsynlegheiten ligg innanfor flata. Kva blir forma og storleiken for atomet i dette tilfellet.

Oppgåve 2 Modifisert boks

La oss sjå på ein partikkel med masse m som i utgangspunktet er i grunntilstanden i eit bokspotensial $V(x)$ som er lik null for $0 < x < L$ og uendeleg utafor. I dette potensialet grev vi ut ein en brønn i midten, slik at $V = -V_0$ for $a < x < L - a$.



Her tenker vi oss at vi held V_0 fast, slik at det er a som minkar under utgravinga. I utgangspunktet er $a = L/2$ og etter utgravinga er $a = 0$. Under denne prosessen vil kvart av energinivåa vere strengt avtagande når a minkar, dvs når breidda av brønnen i midten aukar. Dette gjeld og for grunntilstanden ψ_1, som vi skal fokusere på i denne oppgåva.

a) Finn ut kor stor grunntilstandsenergien E_1 er for $a = L/2$, dvs før utgravinga byrjar. Anta at $V_0 = 16\hbar^2/(2mL^2)$, og finn E_1 for $a = 0$, dvs etter at vi har gravd ut til $-V_0$ over heile boksen.

b) Frå resultata ovanfor følgjer det at grunntilstandsenergien E_1 må vere lik null for ein viss a-verdi a_1. Forklar kvalitativt korleis grunntilstanden ψ_1 ser ut for dette tilfellet, og lag ei prinsippskisse. [Hint: Sidan potensialet heile tida er symmetrisk med omsyn på midtpunktet $x = L/2$ av boksen, vil ψ_1 vere symmetrisk.]

c) Uansett kor a ligg i intervallet $0 < a < L/2$ vil grunntilstanden ha forma $\psi_1 = A\cos[k_1(x-L/2)]$ i intervallet $a < x < L - a$. Forklar. Kor stort er bølgjetalet k_1 for tilfellet $E_1 = 0$?
Brøken a_1/L tilfredsstiller flg. likning:

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

Bruk kontinuiteten til ψ_1'/ψ_1 til å vise dette, og finn konstanten på høgresida. Hjelp: a_1/L ligg mellom 0.33 og 0.35. Bruk kalkulatoren til å finne a_1/L med 3 siffers nøyaktighet (ved å prøve deg fram).