

FYS2140 Kvantefysikk - Vår 2021

Løsningsforslag for Oblig 9

(Versjon 16. april 2021)

Her er løsninger på A Diskusjonsoppgaver, B Regneoppgaver og C Tilleggsoppgaver (ikke obligatorisk).

A Diskusjonsoppgaver

Oppgave 1 Elektrontilstander i hydrogenatomet

Vi har et elektron bundet i et hydrogenatom. I hele oppgaven kan du se bort fra elektronets egenspinn.

- a) Hvilke observable kan vi måle for elektronet i hydrogenatomet?

Svar: Posisjon r , bevegelsesmengde p , totalenergi E (bestående av en kinetisk og en potensiell del), lengden av angulærmoment kvadrert L^2 , samt komponentene L_x , L_y og L_z av angulærmomentet (men disse kan ikke måles alle samtidig!). I tillegg kommer egenspinn S på samme måte som med L , men det ser vi altså bort fra for nå. Masse m og ladning e er jo også målbare, men de betraktes som konstanter i kvantemekanikken.

- b) Hvilke operatorer representerer observablene i a)?

Svar: Operatoren \hat{r} representerer posisjon r , \hat{p} representerer p , Hamilton-operatoren \hat{H} representerer totalenergi, \hat{L}^2 representerer (kvadratet av) lengden til angulærmomentet og \hat{L}_x , \hat{L}_y og \hat{L}_z som representerer x -, y - og z -komponentene til angulærmomentet.

- c) For hvilke av observablene i a) og deres operatorer har vi en egenverdligning slik at $\hat{Q}\psi_{nlm} = q\psi_{nlm}$?

Svar: Vi har egenverdligninger for totalenergi E , lengden av angulærmomentet L^2 og for den ene komponenten av angulærmomentet L . Som regel definerer vi koordinatsystemet vårt slik at den komponenten er L_z . Egenverdligningene er:

$$\begin{aligned}\hat{H}\psi_{nlm} &= E_n\psi_{nlm} \\ \hat{L}^2\psi_{nlm} &= \hbar^2 l(l+1)\psi_{nlm} \\ \hat{L}_z\psi_{nlm} &= \hbar m\psi_{nlm}\end{aligned}\tag{1}$$

- d) Vi ser på et elektron i et hydrogenatom, som befinner seg i egentilstanden ψ_{nlm} . For hvilke av observablene i a) har dette elektronet skarpe verdier?

Svar: De samme som over i c): Totalenergien E , (kvadratet av) lengden av angulærmomentet L^2 og z -komponenten av angulærmomentet L_z .

- e) Forklar med egne ord hva kvantetallene n , l og m i ψ_{nlm} betyr og hvilken informasjon de gir oss.

Svar: Kvantetallet n angir hvilket nivå den kvantiserte energien er på (hvilket trinn i stigen, om du vil). Kvantetallet l angir hvilket nivå den kvantiserte lengden av angulærmomentet L^2 er på, og m angir hvilket nivå den kvantiserte z -komponenten av angulærmomentet er på. Kvantetallene n , l og m inngår i egenverdiene til hhv. energi, lengden av angulærmomentet og z -komponenten til angulærmomentet, sammen med en rekke konstanter, og gir oss derfor mulige utfall av målinger av energi og angulærmoment til elektronet i hydrogenatomet.

- f) I virkeligheten bruker vi eksperimenter til å måle observable. Matematisk kan vi litt rødhåndet si at eksperimentene er uttrykt ved operatorer. Mulige måleresultater representeres ved egenverdier som igjen er uttrykt med ulike kvantetall. Hvilke operatorer har egenverdier uttrykt ved hhv. n , l og m for elektronet i hydrogenatomet?

Svar: Hamiltonoperatoren \hat{H} representerer observabelen energi, og har egenverdier uttrykt ved kvantetallet n . Operatoren \hat{L}^2 representerer observabelen angulærmomentets lengde, og har egenverdier uttrykt ved kvantetallet l . Operatoren \hat{L}_z representerer observabelen angulærmomentets z -komponent, og har egenverdier uttrykt ved kvantetallet m .

- g) Er følgende kombinasjon av måleresultater (på identiske tilstander) for energi og angulærmoment mulig? Begrunn svaret med fysiske argumenter.

$$E = -\frac{m_e e^4 k_e^2}{18\hbar^2}, \quad L^2 = 6\hbar^2 \text{ og } L_z = 3\hbar, \text{ der } k_e = \frac{1}{4\pi\epsilon_0}. \quad (2)$$

Svar: Nei, det er ikke mulig. Energien kan omskrives til $E = -\frac{m_e e^4 k_e^2}{2\hbar^2} \frac{1}{3^2}$ som gir $n = 3$. Videre er $l = 2$ og $m = 3$. De magnetiske kvantetallet m kan ikke være større enn l , da det betyr at z -komponenten ($3\hbar$) er lenger enn totallengden ($\sqrt{2(2+1)}\hbar \approx 2.4\hbar$) av angulærmomentet.

B Regneoppgaver

Oppgave 2 Hydrogenatomet (fra eksamen våren 2005)

I denne oppgaven ser vi bort fra elektronets egenspin. Energi-egentilstandene til hydrogenatomet skrives generelt som

$$\psi_{nlm}(r, \phi, \theta) = R_{nl}(r)Y_l^m(\phi, \theta). \quad (3)$$

- a) Hvilke verdier kan kvantetallene n , l og m ta.

Svar: Hovedkvantetallet n antar verdier $n = 1, 2, 3, \dots$, kvantetallet l tar verdiene $l = 0, 1, \dots, n - 1$ og kvantetallet m er gitt ved $m = -l, -l + 1, \dots, l - 1, l$.

- b) Forklar hva som menes med et sentralsymmetrisk potensial og gi et eksempel. Hvorfor er vinkeldelen av bølgefunksjonen, $Y_l^m(\phi, \theta)$, den samme enten vi ser på hydrogenatomet eller på en *fri* partikkel i tre dimensjoner?

Svar: Et sentralsymmetrisk potensial $V(r)$ er en funksjon kun av avstand r til sentrum av systemet, og uavhengig av vinkler. Coulombpotensialet er et slikt eksempel, gitt ved:

$$V(r) = -\frac{k_e e^2}{r}, \quad (4)$$

hvor k er Coulombs konstant og e er elektronets ladning. Vinkeldelen av bølgefunksjonen er den samme for et elektron bundet i et hydrogenatom og en fri partikkel i tre dimensjoner, fordi begge har et sentralsymmetrisk potensial. Og alle sentralsymmetriske potensial har samme vinkeldel i bølgefunksjonen. For hydrogenatomet er dette et Coulombpotensial og for den fri partikkelen $V(r) = 0$.

Radialdelen av bølgefunksjonen, $R_{nl}(r)$, bestemmes av den radielle Schrödingerligningen som for hydrogenatomet kan skrives som

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{d^2}{dr^2}(rR(r)) + \left[-\frac{k_e e^2}{r} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m_e r^2} \right] (rR(r)) = E \cdot (rR(r)), \quad (5)$$

der m_e er elektronets masse (må ikke forveksles med kvantetallet m) og $k_e \equiv 1/(4\pi\epsilon_0)$. Energispekteret er som kjent gitt ved

$$E_n = -\frac{(k_e e^2)^2 m_e}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2} = -\frac{E_0}{n^2}, \quad (6)$$

der $E_0 = 13.6$ eV.

- c) Vis ved innsetting i den radielle Schrödingerligningen (5) at den radielle bølgefunksjonen

$$R(r) = re^{-\gamma r}, \quad (7)$$

er en løsning for en bestemt verdi av l og γ og at denne løsningen tilsvarer energinivået $n = 2$. Bestem l og γ for denne løsningen. *Hint:* Siden ligningen du får må være oppfylt for alle r , må den være oppfylt separat for hver potens av r som multipliseres med $e^{-\gamma r}$.

Svar: Vi har at

$$\begin{aligned} \frac{d^2}{dr^2}(r^2 e^{-\gamma r}) &= \frac{d}{dr}(2re^{-\gamma r} - \gamma r^2 e^{-\gamma r}) \\ &= 2e^{-\gamma r} - 2\gamma r e^{-\gamma r} - 2\gamma r e^{-\gamma r} + \gamma^2 r^2 e^{-\gamma r} \\ &= (2 - 4\gamma r + \gamma^2 r^2)e^{-\gamma r}, \end{aligned} \quad (8)$$

slik at ved innsetting er den venstre siden av Schrödingerligningen (5) gitt ved

$$\begin{aligned} & -\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{d^2}{dr^2}(rR(r)) + \left[-\frac{k_e e^2}{r} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m_e r^2} \right] (rR(r)) \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{d^2}{dr^2}(r^2 e^{-\gamma r}) + \left[-\frac{k_e e^2}{r} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m_e r^2} \right] (r^2 e^{-\gamma r}) \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m_e} (2 - 4\gamma r + \gamma^2 r^2) e^{-\gamma r} - k_e e^2 r e^{-\gamma r} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m_e} e^{-\gamma r} \\ &= \left(\frac{\hbar^2 l(l+1) - 2\hbar^2}{2m_e} + \frac{2\hbar^2 \gamma - k_e e^2 m_e}{m_e} r - \frac{\hbar^2}{2m_e} \gamma^2 r^2 \right) e^{-\gamma r}. \end{aligned} \quad (9)$$

Her har vi ordnet svaret etter potenser av r . For at dette skal være identisk med den høyre siden, $ErR(r) = Er^2 e^{-\gamma r}$, for alle verdier av r (prøv for eksempel å sette $r = 0$) må vi ha (samtidig):

$$\frac{\hbar^2 l(l+1) - 2\hbar^2}{2m_e} = 0, \quad (10)$$

$$\frac{2\hbar^2 \gamma - k_e e^2 m_e}{m_e} = 0, \quad (11)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e} \gamma^2 = E. \quad (12)$$

Her er (10) oppfylt hvis $l(l+1) = 2$, altså må $l = 1$ (løsningen $l = -2$ er ekskludert siden l ikke kan være negativ). Videre, for å oppfylle (11), må $2\hbar^2 \gamma - k_e e^2 m_e = 0$, eller

$$\gamma = \frac{k_e e^2 m_e}{2\hbar^2}. \quad (13)$$

Ved å sette denne verdien for γ inn i energien i (12) så får vi

$$E = -\frac{\hbar^2}{2m_e}\gamma^2 = -\frac{\hbar^2}{2m_e}\left(\frac{k_e e^2 m_e}{2\hbar^2}\right)^2 = -\frac{(k_e e^2)^2 m_e}{8\hbar^2} = -E_0 \frac{1}{2^2}, \quad (14)$$

hvor vi har brukt (6), noe som betyr at den radielle bølgefunksjonen vi har fått oppgitt er en løsning dersom $n = 2$.

d) Forklar hvorfor den radielle sannsynlighet er definert som

$$P(r) = r^2 \cdot R^2(r), \quad (15)$$

snarere enn bare kvadratet av den radielle bølgefunksjonen, $R^2(r)$. Beregn elektronets mest sannsynlige radius (det vil si mest sannsynlige avstand fra kjernen) i tilstanden i oppgave c). Uttrykk resultatet ved hjelp av Bohrradien $a_0 \equiv \hbar^2/(k_e m_e e^2)$.

Svar: Den radielle sannsynligheten er definert som i (15) da koordinatbyttet fra kartesiske koordinater til sfæriske koordinater har en Jakobideterminant $r^2 \sin \theta$ som er nødvendig for å bevare den totale sannsynligheten, slik at

$$\int_0^\infty P(r) dr = \int_0^\infty r^2 R^2(r) dr = 1. \quad (16)$$

Faktoren $\sin \theta$ dukker tilsvarende opp i den angulære sannsynligheten når vi normerer disse hver for seg.

Den mest sannsynlige radiusen (altså ikke forventningsverdien!) er gitt ved maksimum av den radielle sannsynligheten, som vi finner ved å finne den deriverte av P med hensyn på radien:¹

$$\begin{aligned} \frac{d}{dr}P(r) &= \frac{d}{dr}(r^2 R^2(r)) = \frac{d}{dr}(r^4 e^{-2\gamma r}) \\ &= 4r^3 e^{-2\gamma r} - 2\gamma r^4 e^{-2\gamma r} \\ &= 2(2 - \gamma r)r^3 e^{-2\gamma r}. \end{aligned} \quad (17)$$

Denne har nullpunkt for

$$r = \frac{2}{\gamma} = \frac{2}{\frac{k_e e^2 m_e}{2\hbar^2}} = \frac{4\hbar^2}{k_e e^2 m_e} = 4a_0. \quad (18)$$

¹Du føler kanskje at vi også burde ta hensyn til vinkeldelen av den totale bølgefunksjonen her, men den kan vi uansett integrere ut fra sannsynligheten gjennom å ta integralene over de to vinklene. Dette gir bare et konstant bidrag som ikke påvirker maksimumet. Se ellers Oppgave 4.14 i Griffiths.

At dette faktisk er et maksimum kan man finne fra den annenderiverte

$$\begin{aligned} & \frac{d}{dr}[(2 - \gamma r)r^3 e^{-2\gamma r}] \\ &= -\gamma r^3 e^{-2\gamma r} + 3(2 - \gamma r)r^2 e^{-2\gamma r} - 2\gamma(2 - \gamma r)r^3 e^{-2\gamma r} \\ &= (6r^2 - 8\gamma r^3 + 2\gamma^2 r^4)e^{-2\gamma r} \\ &= 2(3 - 4\gamma r + \gamma^2 r^2)r^2 e^{-2\gamma r}, \end{aligned} \quad (19)$$

som er negativ for $r = 2/\gamma$ da

$$3 - 4\gamma r + \gamma^2 r^2 = 3 - 4\gamma \frac{2}{\gamma} + \gamma^2 \left(\frac{2}{\gamma}\right)^2 = 3 - 8 + 4 = -1. \quad (20)$$

Konklusjonen er at sannsynligheten er maksimal når avstanden er fire ganger Bohrradien, $r = 4a_0$.

C Tilleggsoppgave (ikke obligatorisk)

Oppgave 3 Elektronet i hydrogenets grunntilstand (fra Griffiths Kap.4)

Hva er den *mest sannsynlige* verdien av r for grunntilstanden til hydrogen? (Svaret er *ikke* null!) *Hint*: Du må først finne sannsynligheten for at elektronet befinner seg mellom r og $r + dr$.

Svar: Grunntilstanden har bølgefunksjonen

$$\psi(r, \theta, \phi) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-r/a_0}. \quad (21)$$

Sannsynligheten dP for å finne elektronet i volumelementet $d^3\vec{r}$ er

$$dP(x, y, z) = |\psi(x, y, z)|^2 d^3\vec{r}. \quad (22)$$

I sfæriske koordinater er dette

$$dP(r, \theta, \phi) = |\psi(r, \theta, \phi)|^2 r^2 \sin \theta dr d\theta d\phi. \quad (23)$$

For å finne sannsynligheten i r alene integrerer vi over de andre koordinatene.

$$\begin{aligned} dP(r) &= \int_0^{2\pi} \int_0^\pi |\psi(r, \theta, \phi)|^2 r^2 \sin \theta dr d\theta d\phi \\ &= \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \frac{1}{\pi a_0^3} e^{-2r/a_0} r^2 \sin \theta dr d\theta d\phi \\ &= 2\pi \int_0^\pi \frac{1}{\pi a_0^3} e^{-2r/a_0} r^2 \sin \theta dr d\theta \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= 2\pi \int_0^\pi \sin \theta \, d\theta \cdot \frac{1}{\pi a_0^3} e^{-2r/a_0} r^2 \, dr \\
&= 2\pi \cdot [-\cos \theta]_0^\pi \cdot \frac{1}{\pi a_0^3} e^{-2r/a_0} r^2 \, dr \\
&= 4\pi \cdot \frac{1}{\pi a_0^3} e^{-2r/a_0} r^2 \, dr.
\end{aligned} \tag{24}$$

Siden grunntilstanden er uavhengig av θ og ϕ så bidrar de kun med en faktor 4π . Dette med 4π er greit å huske fordi det gjelder for alle integraler i sfæriske koordinater når integranden er vinkeluavhengig.

Vi får altså sannsynligheten $dP(r) = p(r) \, dr$, hvor

$$p(r) = \frac{4}{a_0^3} r^2 e^{-2r/a_0}. \tag{25}$$

Den maksimale sannsynligheten finnes nå ved derivasjon:

$$\frac{dp}{dr} = \frac{4}{a_0^3} \left(2r e^{-2r/a_0} - \frac{2}{a_0} r^2 e^{-2r/a_0} \right) = \frac{8}{a_0^3} r \left(1 - \frac{r}{a_0} \right) e^{-2r/a_0}, \tag{26}$$

som gir ekstremalpunkt for $r = 0$ og $r = a_0$. $r = 0$ gir $p(0) = 0$ som derfor ikke kan være et maksimum, mens $r = a_0$ gir $p(a_0) = 4e^{-2}/a_0$, slik at $r = a_0$ er den radiusen som er den mest sannsynlige verdien, nettopp den samme radiusen som Bohr kom frem til i sin banemodell.²

²En funksjon som hadde $r = a_0$ som minimum ville ikke kunne virket som en sannsynlighetsfordeling, men om du vil så kan du sjekke at den andrederiverte er negativ.