

# Uke 6: Hydrogenatomet og mangepartikkelsystemer

Simon Elias Schrader

October 4<sup>th</sup> 2024

# Litt om determinanter

- En determinant er en funksjon av en  $n \times n$  matrise som returnerer et tall.
- Se tavlegjennomgang hvordan man beregner determinanter i praksis.
- Determinanter har egenskapen at de bytter fortegn når man bytter kolonner eller rader.
- $\det(A^T) = \det(A)$  for alle matriser  $A$ .
- $\det(A) = 0$  hvis og bare hvis noen av kolonnene/radene er linært avhengige.
- Determinanter brukes til å finne egenverdier:

$$Ax = \lambda x \leftrightarrow (A - \lambda I)x = 0 \leftrightarrow \det(A - \lambda I) = 0$$

- Hva menes egentlig med polariserbarheten  $\alpha$  til et molekyl?

# Diskusjonsoppgaver

- Hva menes egentlig med polariserbarheten  $\alpha$  til et molekyl?
- Q9.8 Hvorfor dominerer sentripetallet det effektive potensialet for små verdier av  $r$  ?

- Hva menes egentlig med polariserbarheten  $\alpha$  til et molekyl?
- Q9.8 Hvorfor dominerer sentripetallet det effektive potensialet for små verdier av  $r$  ?
- Q9.9 Hvis sannsynlighetstettheten for å finne elektronet i 1s-orbitalen i H-atomet har sin maksimale verdi for  $r = 0$ , betyr dette at protonet og elektronet er lokalisert på samme punkt i rommet?

- Hva menes egentlig med polariserbarheten  $\alpha$  til et molekyl?
- Q9.8 Hvorfor dominerer sentripetallet det effektive potensialet for små verdier av  $r$  ?
- Q9.9 Hvis sannsynlighetstettheten for å finne elektronet i 1s-orbitalen i H-atomet har sin maksimale verdi for  $r = 0$ , betyr dette at protonet og elektronet er lokalisert på samme punkt i rommet?
- Q9.11 Hva er enheten til H-atomets energieigenfunksjoner?

- Hva menes egentlig med polariserbarheten  $\alpha$  til et molekyl?
- Q9.8 Hvorfor dominerer sentripetallet det effektive potensialet for små verdier av  $r$  ?
- Q9.9 Hvis sannsynlighetstettheten for å finne elektronet i 1s-orbitalen i H-atomet har sin maksimale verdi for  $r = 0$ , betyr dette at protonet og elektronet er lokalisert på samme punkt i rommet?
- Q9.11 Hva er enheten til H-atomets energieigenfunksjoner?
- Q9.15 Hva er forskjellen mellom en angulær og en radial node? Hvordan kan du skille mellom de to typene noder i et konturdiagram som i Figur 9.7?

- Hva menes egentlig med polariserbarheten  $\alpha$  til et molekyl?
- Q9.8 Hvorfor dominerer sentripetallet det effektive potensialet for små verdier av  $r$  ?
- Q9.9 Hvis sannsynlighetstettheten for å finne elektronet i 1s-orbitalen i H-atomet har sin maksimale verdi for  $r = 0$ , betyr dette at protonet og elektronet er lokalisert på samme punkt i rommet?
- Q9.11 Hva er enheten til H-atomets energieigenfunksjoner?
- Q9.15 Hva er forskjellen mellom en angulær og en radial node? Hvordan kan du skille mellom de to typene noder i et konturdiagram som i Figur 9.7?
- Hvorfor velger vi å bruke en Slater-Determinant for å beskrive bølgefunksjonen til et flerpartikkelsystem?



- P9.28/P9.29 The radius of an atom  $r_{atom}$  can be defined as that value for which 90% of the electron charge is contained within a sphere of radius  $r_{atom}$ . Calculate the radius of the H atom. Use this to calculate the mass density of the H atom.
- P8.4 The force constants for  $^1H_2$  and  $^{79}Br_2$  are 575 and 246  $Nm^{-1}$ , respectively. Calculate the ratio of the vibrational state populations  $\frac{n_1}{n_0}$  and  $\frac{n_2}{n_0}$  at  $T = 250 K$  and at 1250 K.

# Regneoppgaver for dere

- P8.10 A measurement of the vibrational energy levels of  $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$  gives the relationship:

$$\tilde{\nu}(n) = 2170.21 \left( n + \frac{1}{2} \right) \text{ cm}^{-1} - 13.461 \left( n + \frac{1}{2} \right)^2 \text{ cm}^{-1}$$

where  $n$  is the vibrational quantum number. The fundamental vibrational frequency is  $\tilde{\nu}_0 = 2170.21 \text{ cm}^{-1}$ . From these data, calculate the depth  $D_e$  of the Morse potential for  $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$ . Calculate the bond energy of the molecule.

- P9.2 Show that the function  $\left( \frac{r}{a_0} \right) e^{-r/2a_0}$  is a solution of the differential equation for  $R(r)$ :

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e r^2} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{dR(r)}{dr} \right) + \left[ \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right] R(r) = ER(r)$$

for  $l = 1$ . What is the eigenvalue? Using this result, what is the value for the principal quantum number  $n$  for this function?

# Flere regneoppgaver for dere

- Bruk egenskapen at determinanter bytter fortegn når to kolonner/rader byttes med hverandre til å vise at determinanten er lik null når to kolonner/rader er like.
- P9.10 The energy levels for ions with a single electron such as  $\text{He}^+$ ,  $\text{Li}^{2+}$ , and  $\text{Be}^{3+}$  are given by:

$$E_n = -\frac{Z^2 e^2}{8\pi\epsilon_0 a_0 n^2}$$

for  $n = 1, 2, 3, 4, \dots$ . Calculate the ionization energies of H,  $\text{He}^+$ ,  $\text{Li}^{2+}$ , and  $\text{Be}^{3+}$  in their ground states in units of joules.