H2 Vätcatomen

Grundtillståndet beskrivs av vågfunktionen

$$\Psi(r,\theta,\varphi) = N e^{-r/a}$$

, där a - bohrradien ($a = 0{,}529\,\text{Å}$)

För att beräkna slh krävs att vågfunktionen är normaliserad, dvs att slh (elektron någonstans i universum) = 1

$$\Rightarrow \quad 1 = \int \Psi^*\Psi \underbrace{dV}_{=r^2\sin\theta d\theta d\varphi} = \int_0^\infty N^2 e^{-2r/a} 4\pi r^2 dr \qquad (1)$$

Beräkna integralen

$$\int_0^\infty r^2 e^{-2r/a} dr = \begin{Bmatrix}\text{Partiell} \\ \text{integration}\end{Bmatrix} = \left[r^2\left(-\frac{a}{2}\right)e^{-\frac{2r}{a}}\right]_0^\infty + \int_0^\infty 2r\frac{a}{2}e^{-2r/a}dr \overset{\text{P.I}}{=}$$

$$= \left[-\frac{ar^2}{2}e^{-2r/a} + ar\left(-\frac{a}{2}\right)e^{-2r/a}\right]_0^\infty + \int_0^\infty \frac{a^2}{2}e^{-2r/a}dr =$$

$$= -\frac{a}{2}\left[e^{-2r/a}\left(r^2 + ar + \frac{1}{2}a^2\right)\right]_0^\infty = \frac{a^3}{4}$$

(1) ger nu $N^2 \cdot 4\pi \cdot \frac{a^3}{4} = 1 \qquad \Rightarrow N = \sqrt{\frac{1}{\pi a^3}}$

Slh att finna e^- inom en sfär med radien r

$$\underline{P(r)} = \int_0^r \Psi^*\Psi 4\pi r'^2 dr' = \frac{4}{a^3}\left[-\frac{a}{2}e^{-2r/a}\left(r'^2 + ar' + \frac{1}{2}a^2\right)\right]_0^r =$$

$$= \underline{\underline{1 - \frac{2}{a^2}e^{-2r/a}\left(r^2 + ar + \frac{a^2}{2}\right)}}$$

Sätt $r = a$

$$\underline{P(a)} = 1 - 2e^{-2}\left(1 + 1 + \frac{1}{2}\right) = \underline{\underline{0{,}32}}$$

$\boxed{H4}$ **$e^- - p^+$ avstånd i H**

Vilket är det mest sannolika elektron-proton avståndet i en exciterad H-atom $(n=2,\ l=m=0)$.

Givet: $\Psi_{200}(r,\theta,\varphi) = N\cdot\left(\frac{r}{a}-2\right)e^{-r/2a}$

- Slh att finna elektronen i en liten volym $d\mathbf{x}$ runt $\mathbf{x}$

$$dP_{\mathbf{x}} = \Psi^2 d\mathbf{x} = \Psi^2 r^2 \sin\theta\, dr\, d\theta\, d\varphi$$

- Slh att finna elektronen i ett skal med tjocklek dr runt r:

$$dP_r = \int_0^{2\pi}\int_0^{\pi} \Psi^2 r^2 \sin\theta\, dr\, d\theta\, d\varphi = 4\pi\Psi^2 r^2 dr$$

Denna slh är maximal då $\Psi^2 r^2$ är maximal

$$\Psi^2 r^2 = N^2\left(\frac{r}{a}-2\right)^2 r^2 e^{-r/a} = N^2\eta(r)$$

Finn maximum

$$\frac{d\eta}{dr} = \frac{2}{a}\left(\frac{r}{a}-2\right)r^2 e^{-r/a} + \left(\frac{r}{a}-2\right)^2 2r e^{-r/a} - \frac{1}{a}\left(\frac{r}{a}-2\right)^2 r^2 e^{-r/a}$$

$$= r\left(\frac{r}{a}-2\right)e^{-r/a}\left[2\frac{r}{a} + \frac{2r}{a} - 4 - \frac{r^2}{a^2} + \frac{2r}{a}\right] = 0$$

Vi har rötterna

$r = 0$: $\eta(0) = 0$ => minimum

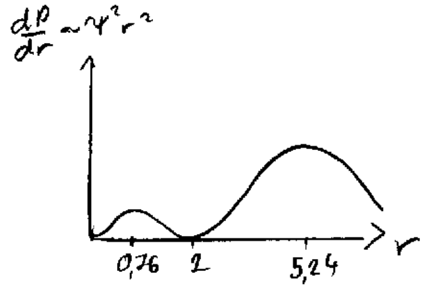
$r = 2a$: $\eta(2a) = 0$ => minimum

$\left(\frac{r}{a}\right)^2 - 6\left(\frac{r}{a}\right) + 4 = 0 \implies \frac{r}{a} = 3 \pm \sqrt{9-4} = 3 \pm \sqrt{5}$

$r = (3-\sqrt{5})a$: $\eta((3-\sqrt{5})a) = 0{,}415\,a^2$

$r = (3+\sqrt{5})a$: $\eta((3+\sqrt{5})a) = 1{,}53\,a^2$

$\therefore$ Max slh att finna e^- vid $r = (3+\sqrt{5})a = 5{,}24\,a$



$\boxed{H8}$

Väte i grundtillståndet:

$\ell.H\, s \quad \Rightarrow \psi(r,\theta,\varphi) = N e^{-r/a}$

Slh att finna e^- i ett skal (tjocklek dr) vid radien r ges av (se H4):

$$dP_r = N^2 e^{-2r/a} r^2 \cdot 4\pi\, dr$$

Skal vid $r = 3a$:

$$dP_r(r=3a) = 4\pi N^2 9a^2 e^{-6} dr$$

Skal vid $r = a/2$

$$dP_r(r=\tfrac{a}{2}) = 4\pi N^2 \frac{a^2}{4} e^{-1} dr$$

$$\Rightarrow \frac{dP_r(r=3a)}{dP_r(r=\frac{a}{2})} = \frac{9e^{-6}}{\frac{1}{4}\cdot e^{-1}} \simeq \underline{\underline{0{,}24}}$$