8.1: Het H-atoom.

Een electron bevindt zich in het Coulomb-veld van een proton. Op $t = 0$ bevindt het zich in de volgende toestand:

$$\Phi(r,0) = 4(2a)^{-3/2}\left\{\exp(-r/a)\frac{1}{\sqrt{4\pi}} + \frac{1}{12\sqrt{6}}(\frac{r}{a})\exp(-r/2a)(-iY_{1,1} + \sqrt{7}Y_{1,0} + Y_{1,-1})\right\}. \qquad (1)$$

Hierin is a de Bohr-straal, 0.053 nm.

Om je rekenwerk te besparen zullen we de eerste paar genormaliseerde eigenfuncties Ψ van de Hamiltoniaan voor een electron in het Coulomb-veld van een proton geven. Vanwege de symmetrie van het systeem ligt het voor de hand om bolcoördinaten r, θ, φ te gebruiken. De eigenfuncties die we hier geven zijn simultaan eigenfuncties van L^2 en L_z. De eigenfuncties $Y_{lm}(\theta,\varphi)$ van L^2 en L_z hangen niet van r af, maar alleen van θ en φ. De totale eigenfunctie $\Psi_{nlm}(r,\theta,\varphi)$ is het produkt van een radieel deel $R_{nl}(r)$ en een bolharmonische $Y_{lm}(\theta,\varphi)$:

$$\Psi_{nlm}(r,\theta,\varphi) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta,\varphi). \qquad (2)$$

Het radiële deel voor de eerste paar combinaties nl is gegeven door:

$$\begin{aligned} R_{1,0}(r) &= 2\frac{1}{a^{3/2}}\exp(-r/a) \\ R_{2,0}(r) &= 2\frac{1}{(2a)^{3/2}}(1-\frac{r}{2a})\exp(-r/2a) \\ R_{2,1}(r) &= \frac{1}{\sqrt{3}}\frac{1}{(2a)^{3/2}}(\frac{r}{a})\exp(-r/2a) \end{aligned}$$

De bolharmonischen $Y_{lm}(\theta,\varphi)$ zijn genormaliseerd op de bol:

$$\int_0^{2\pi} \mathrm{d}\varphi \int_0^{\pi} \mathrm{d}\theta \ \sin\theta \ Y^*_{lm}(\theta,\varphi)Y_{l'm'}(\theta,\varphi) = \delta_{l,l'}\delta_{m,m'} \qquad (3)$$

De nlm zijn de quantumgetallen; zij labelen de eigenfuncties. De met nlm corresponderende energieniveaus zijn:

$$E_{nlm} = \frac{E_1}{n^2}. \qquad (4)$$

De waarde van E_1 is -13.6 eV.

Hint: deze opgave kan zonder veel wiskunde gemaakt worden! Herken eerst de R_{nl} en Y_{lm} in Φ.

a. Bereken de waarde van de normeringsconstante.

b. Wat zijn de mogelijke uitkomsten bij een meting van L^2? Wat zijn de bijbehorende waarschijnlijkheden?

c. Wat is de verwachtingswaarde van L^2? (Hint: gebruik onderdeel b.)

d. Wat is de waarschijnlijkheid om het electron op een afstand tussen r en $r + \mathrm{d}r$ van het proton verwijderd aan te treffen?

e. Welke uitkomsten zijn mogelijk als je L_z meet?

f. Wat is verwachtingswaarde van L_z?

g. Wat is de tijdsafhankelijkheid van $\Phi(r,\theta,\varphi,t)$? (Hint: los de tijdsafhankelijke Schrödingervergelijking op.)

h. Wat is $\Phi(r,t)$ als op $t = 0$ een meting van L_z tot de waarde $+\hbar$ leidt?

i. Wat is $\Phi(r,\theta,\varphi,t)$ als op $t = 0$ een meting van L_z tot de waarde 0 leidt?

j. Wat is de verwachtingswaarde van de energie?

k. Wat is de laagste waarde van de energie die je kunt vinden op $t = 0$?