

# VII. Atomer med en elektron

## VII.1. En speciallösning till den radiella ekvationen

Den radiella differentialekvationen är

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu r^2} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \left( V(r) + \frac{\hbar^2}{2\mu r^2} l(l+1) \right) R = ER \quad (79)$$

Vi sätter in Coulombpotentialen för en atom med en elektron,

$$V(r) = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r} \quad (80)$$

Vi granskar först specialfallet att  $l = 0$  (som ger  $m = 0$ ). Ekvationen ovan blir efter förenkling

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \left( \frac{d^2R}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR}{dr} \right) - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} R = ER \quad (81)$$

Vi gör ansatsen  $R = Ae^{-r/a}$  och gör en insättning i SE. Efter förenkling erhåller vi

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2\mu a^2} - E \right) + \left( \frac{\hbar^2}{\mu a} - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \right) \frac{1}{r} = 0 \quad (82)$$

som är sant om bägge termer var för sig (konstanten och koefficienten framför  $1/r$ ) är noll, eftersom termerna är lineärt oberoende. Vi får efter förenkling

$$a = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{Ze^2\mu} = \frac{m a_0}{\mu Z} \quad (83)$$

som kallas *längdparametern* (vi använde Bohrradien  $a_0$  i kap. IV.6), och

$$E = -\frac{\hbar^2}{2\mu a^2} = -\frac{\mu}{m} Z^2 E_0 \quad (84)$$

där  $E_0$  är Rydbergenergin (som definierades i samma kapitel). Den erhållna energin är grundtillståndets energi, som sammanfaller med Bohrmodellens förutsägelse.

## VII.2. Den allmänna lösningen till den radiella ekvationen

Vi skriver nu den radiella differentialekvationen som (se 64)

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu r} \frac{d^2(rR)}{dr^2} - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} R + \frac{\hbar^2}{2\mu r^2} l(l+1)R = ER \quad (85)$$

och utför substitutionerna

$$r = \rho a \quad (86)$$

och

$$E = -\frac{\hbar^2}{2\mu a^2} \eta \quad (87)$$

Ansatsen (87) är central, emedan uttrycket kommer att ge atomernas energinivåer. Insättning i den radiella ekvationen och förenkling ger

$$\frac{d^2}{d\rho^2}(\rho R) + 2R - \frac{l(l+1)}{\rho}R = \eta\rho R \quad (88)$$

Ansatsen

$$R = e^{-\sqrt{\eta}\rho} \frac{F(\rho)}{\rho} \quad (89)$$

ger efter förenkling

$$\frac{d^2 F}{d\rho^2} - 2\sqrt{\eta} \frac{dF}{d\rho} + \left( \frac{2}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right) F = 0 \quad (90)$$

Vi antar nu att  $F$  är ett polynom enligt

$$F(\rho) = A(a_1\rho^{l+1} + a_2\rho^{l+2} + \dots + a_n\rho^n) \quad (91)$$

Vi noterar först att för grundtillståndet  $l = 0$  gäller lösningen

$$R = Ae^{-\rho}$$

Detta motsvaras av

$$F(\rho) = A\rho$$

som ger oss

$$a_1 = 1 \tag{92}$$

och

$$n = 1$$

Vi noterar också att  $n$  är större än  $l + 1$  (antagandet i ekvation 91), vilket ger oss  $l \leq n - 1$  eller

$$l = 0, 1, 2, 3, \dots, n - 1 \quad (93)$$

En insättning av polynomet  $F(\rho)$  i differentialekvationen för  $F$  ger en summa av termer med olika grader på  $\rho$ , och att summan har värdet noll, enligt mönstret

$$(A_{00}\rho^0 + \dots + A_{0j_0}\rho^0) + (A_{10}\rho^1 + \dots + A_{1j_1}\rho^1) + \dots + (A_{k0}\rho^k + \dots + A_{kj_k}\rho^k) = 0$$

Detta är möjligt om koefficienten framför alla  $\rho$  av olika grad är noll, enligt

$$\begin{aligned} A_{00} + \dots + A_{0j_0} &= 0 \\ A_{10} + \dots + A_{1j_1} &= 0 \\ &\dots \\ A_{k0} + \dots + A_{kj_k} &= 0 \end{aligned}$$

eftersom  $\rho^0 = 1, \rho^1 = \rho, \rho^2, \dots, \rho^k$  alla är lineärt oberoende av varandra. Från  $\rho^{n-1}$ -termen får man

$$-2\sqrt{\eta}na_n + 2a_n = 0$$

eller

$$\sqrt{\eta} = \frac{1}{n}$$

Man kan också härleda rekursionsformeln

$$a_{k+1} = \frac{2(k/n - 1)}{k(k+1) - l(l+1)} a_k \quad (94)$$

Den radiella vågfunktionen är alltså

$$R_{nl} = e^{-\rho/n} \frac{F(\rho)}{\rho}, \quad \rho = r/a \quad (95)$$



där polynomet  $F$  (med det allmänna utseendet ovan) konstrueras utgående från kvanttalen  $n$  och  $l$ , med hjälp av rekursionsformeln ovan för koefficienterna i polynomet. De färdiga radiella vågfunktionerna listas i Tabell .

$n = 1$	$l = 0$	$R_{10} = \frac{2}{\sqrt{a^3}} e^{-\rho}$
$n = 2$	$l = 0$	$R_{20} = \frac{1}{\sqrt{2a^3}} \left(1 - \frac{\rho}{2}\right) e^{-\rho/2}$
	$l = 1$	$R_{21} = \frac{1}{2\sqrt{6a^3}} \rho e^{-\rho/2}$
$n = 3$	$l = 0$	$R_{30} = \frac{2}{3\sqrt{3a^3}} \left(1 - \frac{2}{3}\rho + \frac{2}{27}\rho^2\right) e^{-\rho/3}$
	$l = 1$	$R_{31} = \frac{8}{27\sqrt{6a^3}} \rho \left(1 - \frac{\rho}{6}\right) e^{-\rho/3}$
	$l = 2$	$R_{32} = \frac{4}{81\sqrt{30a^3}} \rho^2 e^{-\rho/3}$

Tabell 2: De första radiella vågfunktionerna. Parametern  $\rho = r/a$ .

Energien ges av ekvation (87), och då vi beaktar att  $\eta = 1/n^2$  (se resultatet ovan) får vi

$$E_{nl} = -\frac{\mu}{m} Z^2 \frac{E_0}{n^2} = E_n \quad (96)$$

som motsvarar Bohrmodellens resultat.

De radiella vågfunktionerna har liknande ortogonalitetssegenskaper som  $\psi$  och  $Y$ :

$$\int R_{n'l'}^* R_{nl} r^2 dr = 0, \quad \text{om } (n', l') \neq (n, l) \quad (97)$$

## VII.3. Degeneration

Vi har kommit fram till att en elektron med massan  $m$  och en atomkärna med massan  $M$ , vilka rör sig i cirkelformade banor runt ett gemensamt masscentrum är ekvivalent med en reducerad massa  $\mu = mM/(m + M)$  som rör sig runt  $M$ . För detta system kan vi bilda en Schrödingerekvation. Förutsatt att energierna är stationära och att potentialen är en Coulombpotential, så kan Schrödingerekvationens lösning skrivas som

$$\Psi_{nlm} = R_{nl}Y_{lm}e^{-iE_n t/\hbar} \quad (98)$$

och den tidsberoende som

$$\psi_{nlm} = R_{nl}Y_{lm} = R_{nl}\Theta_{lm}(\theta)\Phi_m(\phi) \quad (99)$$

Detta är elektronens (den reducerade massans) vågfunktion, och den har tre kvanttal  $(n, l, m)$ , för vilka gäller

$$n \in \mathbb{N} = \{1, 2, 3, \dots\} \quad (100)$$

$$l = 0, 1, 2, \dots, n - 1 \quad (101)$$

$$m = -l, -l + 1, \dots, 0, \dots, l - 1, l \quad (102)$$

$n$  kallas *huvudkvanttal*,  $l$  sidokvanttal och  $m$  magnetiskt kvanttal. Se tabellen nedan. Huvudkvanttalet  $n$  definierar energin samt elektronskal i atommodellen.

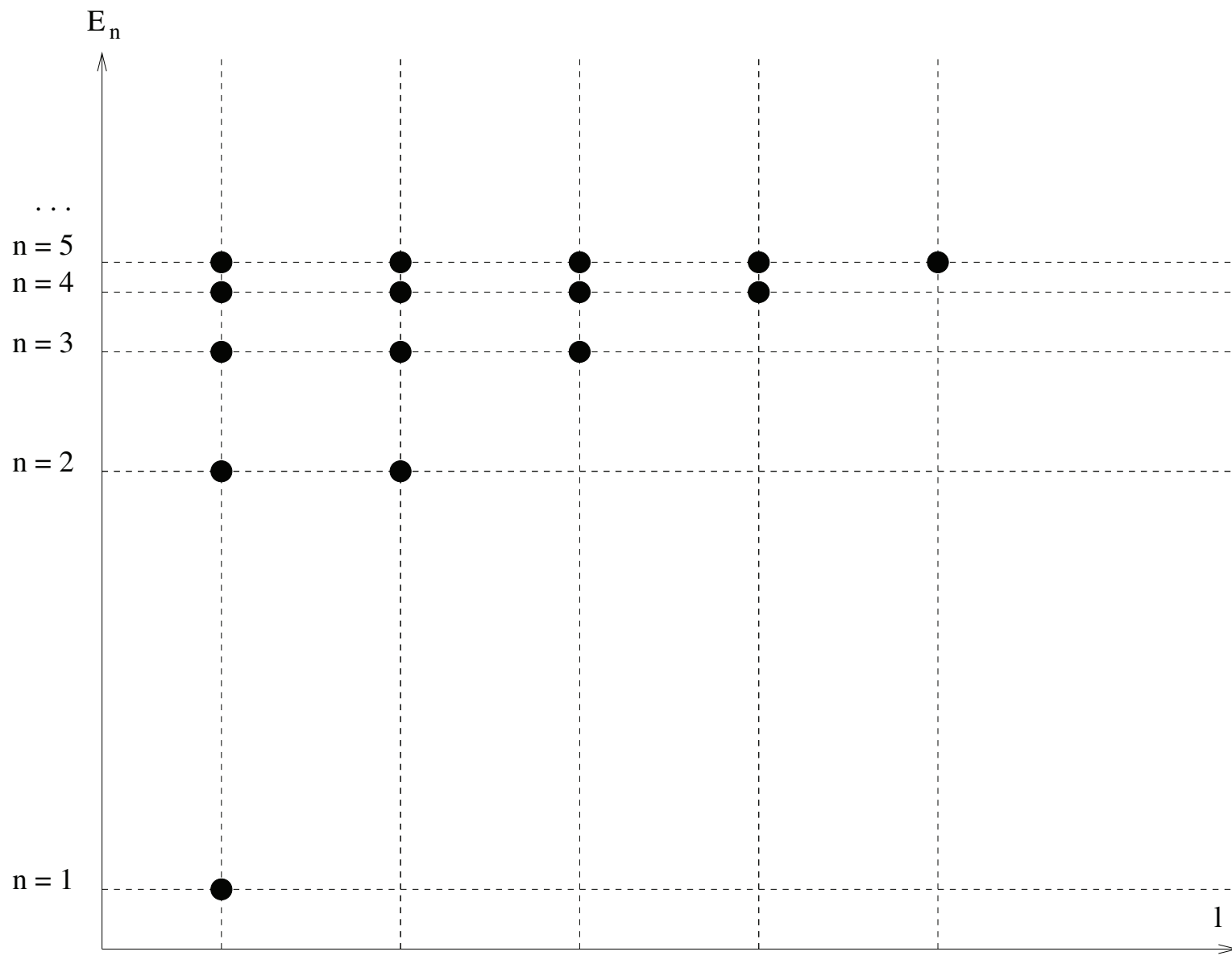
Huvudkvanttal $n$	Skal
1	K
2	L
3	M
4	N
5	O
6	P
$\vdots$	$\vdots$
Sidokvanttal $l$	Orbital
0	s
1	p
2	d
3	f
4	g
5	h
$\vdots$	$\vdots$

Tabell 3: Spektroskopisk notation.

Elektronens energi är

$$E_n = -\frac{\mu}{m} Z^2 \frac{E_0}{n^2} \quad (103)$$

Då ett värde på  $n$  ger lika många värden på  $l$  (enligt ekvation 101), och ett värde på  $l$  ger  $2l + 1$  värden på  $m$ , ser vi att det finns flera tillstånd med samma energi. Detta kallas *degeneration*. Degenerationen illustreras i figur 6.



Figur 6: Energinivåer i en atom med en elektron

Exempel:

Väteatomens grundtillstånd ges av  $n = 1$ ,  $l = 0$ ,  $m = 0$ . Elektronen i grundtillståndet är alltså i orbitalen 1s. Grundtillståndets vågfunktion  $\psi_{100}$  är

$$R_{10} = 2\left(\frac{1}{a}\right)^{3/2} e^{-\frac{r}{a}}$$
$$Y_{00} = \sqrt{\frac{1}{4\pi}}$$
$$\Rightarrow \psi_{100} = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-\frac{r}{a}}$$



## VII.4. Sannolikhetsfunktionen och väntevärden

Sannolikheten att finna elektronen i volymselementet  $d\tau = r^2 dr d\Omega$  ges av

$$\begin{aligned} P_{nlm} d\tau = ||\Psi_{nlm}||^2 d\tau &= ||R_{nl}||^2 r^2 dr ||Y_{lm}||^2 d\Omega \\ &= r^2 (R_{nl})^2 dr ||Y_{lm}||^2 d\Omega \\ &= r^2 (R_{nl}(r))^2 dr ||\Theta_{lm}||^2 \sin \theta d\theta ||\Phi_{lm}(\phi)||^2 d\phi \\ &= r^2 (R_{nl}(r))^2 dr ||\Theta_{lm}||^2 \sin \theta d\theta d\phi \\ &= P_{nl} r^2 dr P_{lm} d\Omega \end{aligned} \tag{104}$$

då  $||\Phi_{lm}(\phi)||^2 d\phi = e^{-im\phi} e^{im\phi} d\phi = d\phi$ .  $P_{nl}$  är den radiella sannolikhetsfördelningen.  $R_{nl}^* = R_{nl}$  eftersom den radiella vågfunktionen alltid är reell. Sannolikhetsfördelningen beror alltså bara av radien  $r$  och polärvinkeln  $\theta$ , vilket medför att den är symmetrisk kring  $z$ -axeln. Fördelningen är sfärisk endast för  $(n, l, m) = (1, 0, 0)$ .

Här gäller att

$$\begin{aligned} \int_{\text{hela världen}} ||\Psi_{nlm}||^2 d\tau &= \int_0^\infty P_{nl} r^2 dr \int_{\text{alla rymdvinklar}} P_{lm} d\Omega \\ &= 1 \cdot 1 = 1 \end{aligned}$$

Väntevärdet av den allmänna storheten  $F(r, \theta, \phi)$  beräknas som

$$\langle F \rangle = \int_{\text{hela världen}} \Psi_{nlm}^* F_{op}(r, \theta, \phi) \Psi_{nlm} d\tau \quad (105)$$

Om  $F$  endast beror av radien  $r$  så fås

$$\langle F \rangle = \int_0^\infty R_{nl}^* F_{op}(r) R_{nl} r^2 dr \quad (106)$$

Vi listar nu några användbara väntevärden.

$$\langle r \rangle = an^2 \left( 1 + \frac{1}{2} \left( 1 - \frac{l(l+1)}{n^2} \right) \right) \quad (107)$$

$$\left\langle \frac{1}{r} \right\rangle = \frac{1}{an^2} \quad (108)$$

$$\left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle = \frac{2}{a^2 n^3 (2l+1)} \quad (109)$$

$$\left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle = \frac{2}{a^3 n^3 l(l+1)(2l+1)} \quad (110)$$

$$\langle V \rangle = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \left\langle \frac{1}{r} \right\rangle = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 an^2} \quad (111)$$

Vi exemplifierar med det ickedegenererade grundtillståndet  $(n, l, m) = (1, 0, 0)$ . Den tidsberoende vågfunktionen är (se Tabell 7.1 och 6.1)

$$\psi_{100} = R_{10}Y_{00} = \frac{2}{\sqrt{a^3}}e^{-\rho}\sqrt{\frac{1}{4\pi}} = \frac{e^{-r/a}}{\sqrt{\pi}\sqrt{a^3}} \quad (112)$$

Den radiella sannolikhetsfördelningen är

$$P_{10} = r^2 R_{10}^2 = \frac{4}{a^3}r^2 e^{-2r/a} \quad (113)$$

Den förväntade radien är då

$$\begin{aligned} \langle r \rangle &= \int_0^\infty R_{nl}^* r R_{nl} r^2 dr \\ &= \int_0^\infty r^3 R_{nl}^2 dr = \int_0^\infty r P_{10} dr \\ &= \int_0^\infty \frac{4}{a^3} r^3 e^{-2r/a} dr \\ &= \frac{3}{2}a \end{aligned} \quad (114)$$

där vi i det sista steget använt ekvation (118). Den förväntade radien är enligt ekvation (107)

$$\langle r \rangle = a \left( 1 + \frac{1}{2} \left( 1 - \frac{0}{1} \right) \right) = \frac{3}{2}a \quad (115)$$

vilket alltså överensstämmer med resultatet (114).

Vi söker nu det värde på radien som maximerar  $P_{10}$ :

$$0 = \frac{dP_{10}}{dr} = \frac{8}{a^3} r e^{-2r/a} + \frac{4}{a^3} r^2 \left( -\frac{2}{a} \right) e^{-2r/a} = \frac{8}{a^3} r \left( 1 - \frac{r}{a} \right) e^{-2r/a} \quad (116)$$

eller

$$r = a \quad (117)$$

Väntevärdet sammanfaller alltså inte med maximet för sannolikhetsfördelningen!

Exempel: Normalisering av vågfunktionen för väte

Det sfäriska volymelementet är

$$d\tau = dS \cdot dr = r^2 d\Omega dr = r^2 dr \sin \theta d\theta d\phi$$

(Volymen av den lilla lådan är  $dS \cdot dr = r dr \sin \theta d\phi \cdot r d\theta \cdot dr = r^2 dr \sin \theta d\theta d\phi$ .)

Vågfunktionen  $\Psi_{100}$  normaliseras som

$$\begin{aligned} \int |\Psi_{100}|^2 d\tau &= \int \frac{1}{\pi a_0^3} e^{-\frac{2r}{a_0}} r^2 dr d\Omega \\ &= \int_0^\pi \int_0^{2\pi} d\Omega \int_0^\infty \frac{1}{\pi a_0^3} e^{-\frac{2r}{a_0}} r^2 dr \\ &= \frac{4\pi}{\pi a_0^3} \int_0^\infty r^2 e^{-\frac{2r}{a_0}} dr \\ &= \frac{4}{a_0^3} 2! \left(\frac{a_0}{2}\right)^3 = 1 \end{aligned}$$

Den givna vågfunktionen  $\Psi_{100}$  är alltså normaliserad. Här har vi utnyttjat den användbara integralen

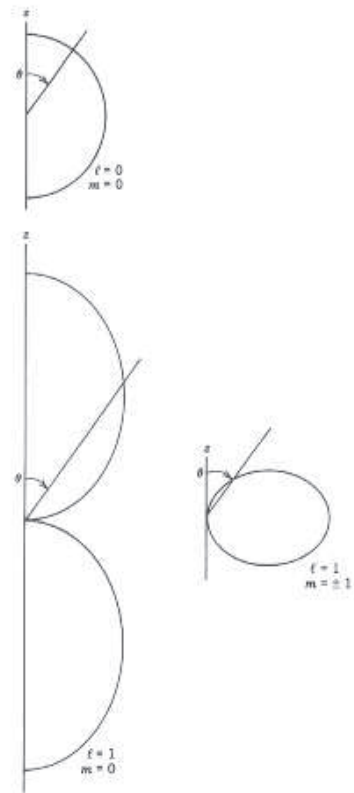
$$\int_0^{\infty} r^n e^{-r/r_0} dr = n! r_0^{n+1} \quad (118)$$

*Härledning av 118.* Vi integrerar partiellt. Sätt  $f_1(r) = r^n$  och  $f_2'(r) = e^{-r/r_0}$ .

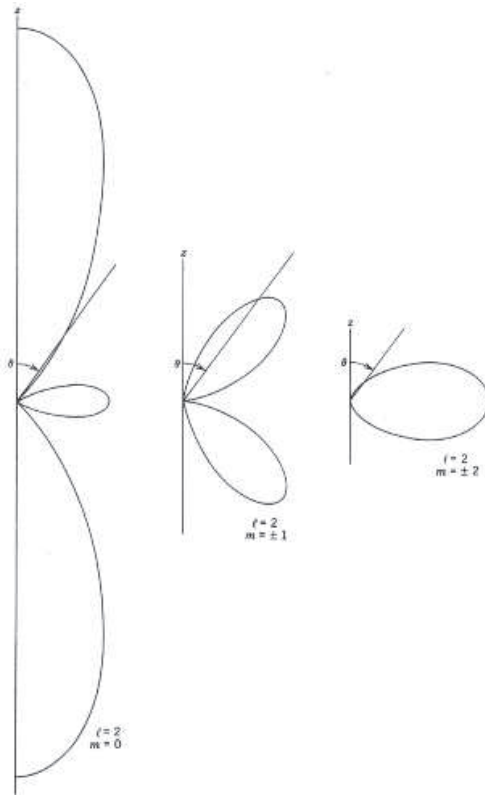
$$\begin{aligned} \int_0^{\infty} r^n e^{-r/r_0} dr &= \left( \lim_{r \rightarrow \infty -} r^n (-r_0) e^{-r/r_0} - \lim_{r \rightarrow 0 +} r^n (-r_0) e^{-r/r_0} \right) \\ &\quad - \int_0^{\infty} n r^{n-1} (-r_0) e^{-r/r_0} dr \\ &= 0 + r_0 n \int_0^{\infty} r^{n-1} e^{-r/r_0} dr \\ &= r_0^2 n(n-1) \int_0^{\infty} r^{n-2} e^{-r/r_0} dr \\ &= \dots \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} &= r_0^n n! \int_0^\infty e^{-r/r_0} dr \\ &= r_0^{n+1} n! \end{aligned}$$

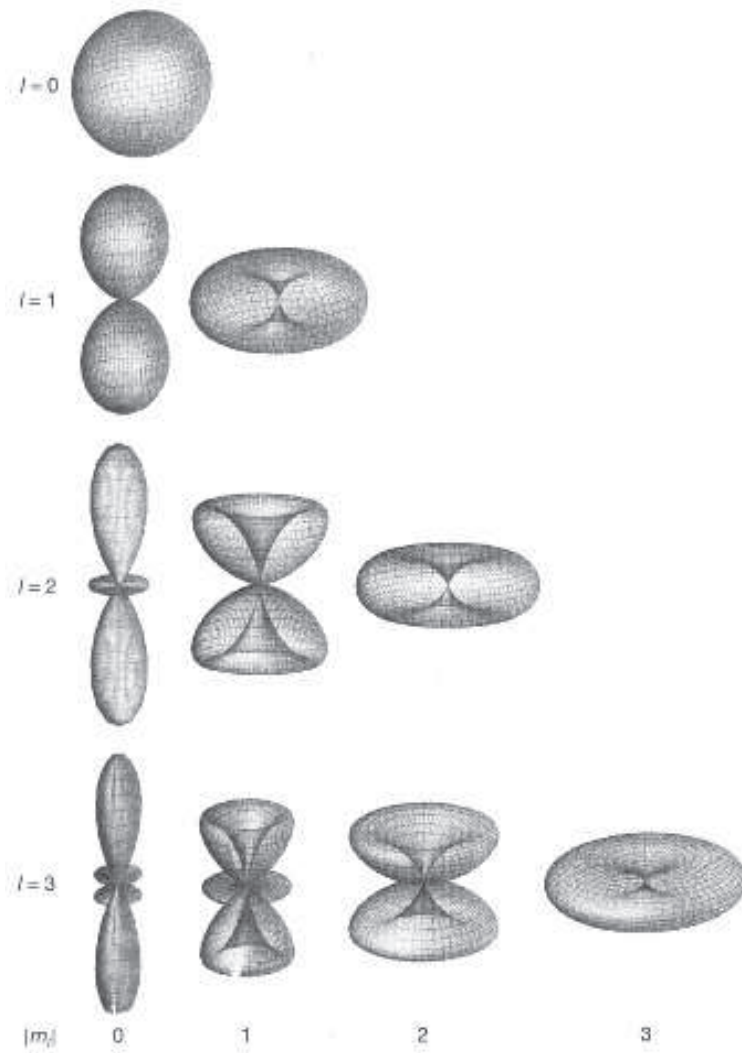




Figur 7: Vågfunktionerna för  $l = 0, 1$



Figur 8: Vågfunktionerna för  $l = 2$



Figur 9: Vågfunktionerna en gång till i 3D

## VII.5. Urvalsregler

Vi vet att strålning avges från atomen då elektronen byter energitillstånd. Vi vet också att oscillerande elektriska dipoler utsänder elektromagnetisk strålning. Av detta kan man göra en semiklassisk modell för att matematiskt förklara strålningen.

Vi använder väntevärdet av dipolmomentet:

$$-e \langle \mathbf{r} \rangle = -e \int \Psi^* \mathbf{r} \Psi d\tau$$

$\Psi$  kan inte svara mot ett egentillstånd i atomen, för då skulle dipolmomentet vara tidsberoende och ingen strålning skulle utsändas. Detta bekräftar Bohrs postulat om ickestrålande stationära elektronbanor i atomen. Eftersom strålning sänds ut då elektronen byter energitillstånd, d.v.s. byter vågfunktion, kan vi tänka oss att  $\Psi$  svarar mot en överlagring av två tillstånd — det som elektronen lämnar och det som den kommer till. Det visar sig att detta leder till ett dipolmoment som är tidsberoende.

Vi skriver superpositionen av de två tillstånden som

$$\Psi = A\psi_{nlm}e^{-iE_{nl}t/\hbar} + B\psi_{n'l'm'}e^{-iE_{n'l'}t/\hbar}$$

där  $A, B$  är komplexa koefficienter. Dipolmomentet blir

$$-e \langle \mathbf{r} \rangle = -e \int \mathbf{r} (||A\psi_{nlm}||^2 + A^*B\psi_{nlm}^*\psi_{n'l'm'}e^{i\omega t} + B^*A\psi_{n'l'm'}^*\psi_{nlm}e^{-i\omega t} + ||B\psi_{n'l'm'}||^2) d\tau$$

där vi betecknar  $\omega = \frac{E_n - E_{n'}}{\hbar}$ , som är vinkelfrekvensen för den utsända elektromagnetiska strålningen (kvantumet  $h\nu = \hbar\omega$ ) då elektronen går från tillståndet  $(n, l, m)$  till  $(n', l', m')$ . Faktorn

$$\int \psi_{n'l'm'}^* \mathbf{r} \psi_{nlm} d\tau$$

i den tredje termen kallas *dipolövergångsamplituden* och betecknar styrkan eller sannolikheten för övergången. Integralen definierar en vektorkvantitet i vilken  $\mathbf{r}$  har komponenterna  $(r \sin \theta \cos \phi, r \sin \theta \sin \phi, r \cos \theta)$ , vilket ger följande komponenter i övergångsamplituden

$$\int \psi_{n'l'm'}^*(x, y, z) \psi_{nlm} d\tau = \int \psi_{n'l'm'}^*(r \sin \theta \cos \phi, r \sin \theta \sin \phi, r \cos \theta) \psi_{nlm} d\tau$$

som har komponenterna

$$\int_0^\infty R_{n'l'} r R_{nl} r^2 dr \int Y_{l'm'}^* \sin \theta \cos \phi Y_{lm} d\Omega$$

$$\int_0^\infty R_{n'l'} r R_{nl} r^2 dr \int Y_{l'm'}^* \sin \theta \sin \phi Y_{lm} d\Omega$$

$$\int_0^\infty R_{n'l'} r R_{nl} r^2 dr \int Y_{l'm'}^* \cos \theta Y_{lm} d\Omega$$

Åtminstone en av dessa komponenter skall vara olika noll för att strålning skall sändas ut. Detta leder till vissa restriktioner på kvanttalen  $(n', l', m')$  och  $(n, l, m)$ . Restriktionen på  $m$  är lättast att visa. De tre integralerna ovan kan alla var för sig uttryckas som en produkt av en integral i  $r$ , en integral i  $\theta$  och en integral i  $\phi$ . Vi plockar ut de inalles tre  $\phi$ -integralerna:

$$\int_0^{2\pi} e^{-im'\phi} \cos \phi e^{im\phi} d\phi$$

$$\int_0^{2\pi} e^{-im'\phi} \sin \phi e^{im\phi} d\phi$$

$$\int_0^{2\pi} e^{-im'\phi} e^{im\phi} d\phi$$

Genom att skriva om de trigonometriska uttrycken med exponentialfunktioner enligt

$$e^{\pm ix} = \cos x \pm i \sin x \quad (119)$$

$$\cos x = \frac{e^{ix} + e^{-ix}}{2} \quad (120)$$

$$\sin x = \frac{e^{ix} - e^{-ix}}{2i} \quad (121)$$

kan man lätt visa att dessa integraler är skilda från noll om

$$m' = m - 1, m \text{ eller } m + 1$$

Man kan också visa att  $\theta$ -integralerna är skilda från noll om

$$l' = l - 1 \text{ eller } l + 1$$

Således gäller att endast sådana energiövergångar som uppfyller

$$\Delta m = -1, 0, 1 \quad (122)$$

$$\Delta l = -1, 1 \quad (123)$$

är tillåtna. Detta är den elektromagnetiska strålningens *urvalsregler*.

Egenfunktionerna  $\psi$  har som vi sett tidigare bestämd paritet, eftersom Coulombpotentialen är symmetrisk vid spegling genom origo. Denna paritet uttrycks med  $(-1)^l$ . Kombinerar vi detta med



regeln för hur  $l$  ändrar vid en energiövergång ser vi att pariteten alltid förändras vid en fotonemission. Den emitterade fotonen har alltid pariteten  $-1$ .

Då rörelsemängdsmomentet bevaras vektoriellt betyder detta att också  $L_z$ -komponenterna bevaras. Vi beaktar att  $m' = m - 1, m$  eller  $m + 1$  efter fotonemissionen och noterar att  $m_\gamma = -1, 0$  eller  $1$ . Då  $l' = l \pm 1$  måste  $l_\gamma$  vara olika n noll, alltså  $l_\gamma = 1$ . Fotonen bär således också iväg med rörelsemängdsmomentet  $L_\gamma = \hbar$ .

## Uppgifter

- [1] En roterande vätemolekyl kan uppfattas som en rotation av två massiva klot bundna till varandra så , att avståndet mellan kloten hålls konstant. Rita upp energinivådiagrammet för de bundna tillstånden i detta system och ange vilka kvanttal och vilken degenerering varje energinivå har. Avståndet mellan väteatomerna är  $0,075$  nm. Beräkna det numeriska värdet för energiskalans enhet  $\frac{\hbar^2}{I}$ , där  $I$  är beteckningen för tröghetsmomentet. Bestäm energin för de tillåtna övergångarna som följer urvalsregeln  $\Delta l = \pm 2$ . Vilken våglängd har övergången  $l = 2 \rightarrow l = 0$ . (B & M 6.10).
- [2] Verifiera ortogonalitetsegenskaperna hos de två paren av klotyttnfunktioner  $Y_{21}$  och  $Y_{20}$  samt  $Y_{21}$  och  $Y_{11}$  genom beräkning av integralerna  $\int Y_{21}^* Y_{20} d\Omega$  och  $\int Y_{21}^* Y_{11} d\Omega$ . (B & M 6.17).
- [3] För varje värde på  $l$  har den radiella lösningen för en atom med en elektron formen

$R = e^{-\rho/n} \frac{F(\rho)}{\rho}$  med  $\rho = \frac{r}{a}$ , där  $F(\rho) = A \sum_{k=l+1}^n a_k \rho^k$  är ett  $n$ :te gradens polynom med  $a_{l+1} = 1$ . Härled rekursionsformeln  $a_{k+1} = 2 \frac{k/n-1}{k(k+1)-l(l+1)} a_k$  som relaterar de successiva koefficienterna i polynomet. (B & M 7.3).

- [4] Låt en atom vara i ett grundtillstånd med kvanttalen  $n = 2$  och  $l = 1$ . Bestäm det mest sannolika avståndet mellan elektronen och kärnan. Beräkna väntevärdena  $\langle r \rangle$  och  $\langle V \rangle$  via integrering och jämför resultaten med de resultat som formlerna i kompendiet ger. (B & M 7.7).
- [5] Elektronen i en atom med en elektron befinner sig i sitt grundtillstånd. Beräkna sannolikheten för att elektronen skall befinna sig utanför det första Bohr-orbitalet. (B & M 7.9).
- [6] Härled en formel för elektronens medelhastighet runt kärnan i en atom med en elektron. Jämför resultatet med det som hittats för elektronens hastighet i Bohratomen. (B & M 7.10).