

# Kvantemekanik og kemiske bindinger 2

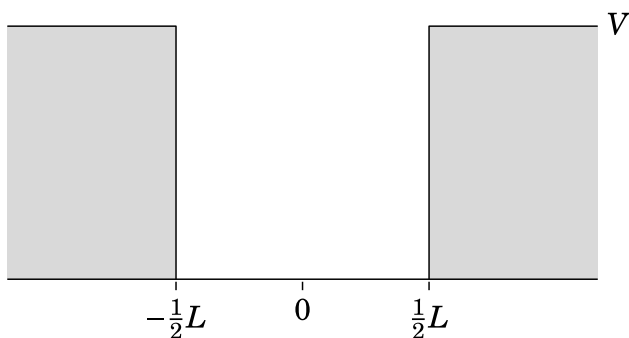
## Den endelige kvantemekaniske brønd i én dimension

PALLE JØRGENSEN, Odder Gymnasium

I denne artikelserie vil jeg illustrere, hvordan et simpelt kvantemekanisk system, nemlig den kvantemekaniske brønd, kan bruges til at forklare kemiske bindinger. Forrige artikel omhandlede den uendelige kvantemekaniske brønd. I denne artikel vil jeg nærme mig virkeligheden en lille smule ved, at brønden ikke længere er uendelig dyb.

### Den endelige kvantemekaniske brønd

Den endelige kvantemekaniske brønd minder om den uendelige. I dette potential er de områder, der er forbudte for den uendelige brønd, nu kun klassisk forbudte, men ikke kvantemekaniske. Jeg vil herefter referere til dem som forbudte områder. For den endelige brønd er mulighed for at finde løsninger, hvor  $E > V$ , altså frie partikler. Dem vil jeg kort behandle i slutningen af artiklen. Hovedparten af artiklen vil omhandle de bundne tilstande.



Figur 1

Den endelige brønd. For  $x > L/2$  og  $x < -L/2$  er  $V(x)$  en konstant  $V$  og er klassisk forbudte områder for bundne tilstande,  $E < V$ .

### Schrödingerligningen for den endelige brønd

#### I de tilladte områder

Schrödingerligningen – og dens løsninger – i det tilladte område er den samme, som for den uendelige brønd. Schrödingerligningen lyder

$$-\frac{1}{2} \cdot \frac{d^2 U}{dx^2} = E \cdot U$$

og løsningen

$$U(x) = A \cdot \sin(k \cdot x)$$

og

$$U(x) = A \cdot \cos(k \cdot x)$$

for hhv. ulige og lige løsninger, og hvor  $k$  er givet ved

$$k = \sqrt{2 \cdot E} \quad \text{og} \quad E = \frac{k^2}{2}$$

#### I de forbudte områder

I de forbudte områder lyder schrödingerligningen

$$-\frac{1}{2} \cdot \frac{d^2 U}{dx^2} + V \cdot U = E \cdot U$$

der kan omskrives til

$$\frac{d^2 U}{dx^2} = 2 \cdot (V - E)$$

Her skal det bemærkes, at jeg kun leder efter bundne tilstande, og kan derfor antage, at  $V > E$  og dermed er  $2 \cdot (V - E) > 0$ .

Lige som for den uendelige brønd og for de tilladte områder, er løsningen velkendt:

$$U(x) = A \cdot \exp(a \cdot x) + B \cdot \exp(-a \cdot x)$$

hvor

$$a = \sqrt{2 \cdot (V - E)}$$

Igen kan koefficienterne findes ved randværdibetingelserne. Da

området  $x > \frac{1}{2}L$  er klassisk forbudt, må vi kræve at  $U(x) \rightarrow 0$ ,

når  $x \rightarrow \infty$ . Derved er løsningen

$$U(x) = B \cdot \exp(-a \cdot x)$$

når  $x > \frac{1}{2}L$  og på helt tilsvarende vis

$$U(x) = B \cdot \exp(a \cdot x)$$

når  $x < -\frac{1}{2}L$ .

#### Bundne tilstande

De bundne tilstande kan nu findes ved at konstruere lige og ulige funktioner.

De lige funktioner er således givet ved

$$U(x) = \begin{cases} B \cdot \exp(a \cdot x), & x < -\frac{1}{2}L \\ A \cdot \cos(k \cdot x), & -\frac{1}{2}L < x < \frac{1}{2}L \\ B \cdot \exp(-a \cdot x), & x > \frac{1}{2}L \end{cases}$$

og de ulige funktioner ved



$$U(x) = \begin{cases} B \cdot \exp(a \cdot x), & x < -\frac{1}{2}L \\ A \cdot \sin(k \cdot x), & -\frac{1}{2}L < x < \frac{1}{2}L \\ -B \cdot \exp(-a \cdot x), & x > \frac{1}{2}L \end{cases}$$

Værdierne for  $A$  og  $B$  må findes ved randværdibetingelserne. Både  $U(x)$  og  $U'(x)$  skal være kontinuerte for alle værdier af  $x$ , og således også når  $x = L/2$ .

Størrelsen af  $A$  kan vælges arbitrært, og jeg sætter den til  $A = 1$ . Tilbage er der to ubekendte,  $B$  og  $E$ . Det giver to ligninger med to ubekendte, der kan løses ved numeriske metoder i et CAS-program:

$$B \cdot \exp\left(a \cdot \frac{L}{2}\right) = \cos\left(k \cdot \frac{L}{2}\right) \quad \text{og}$$

$$a \cdot B \cdot \exp\left(a \cdot \frac{L}{2}\right) = -k \cdot \sin\left(k \cdot \frac{L}{2}\right)$$

når man husker, at  $a = \sqrt{2 \cdot (V - E)}$  og  $k = \sqrt{2 \cdot E}$ .

- Her kommer fjerde didaktiske gevinst. Man kan løse idealiserede situationer som den uendelige brønd ved analytiske og algebraiske metoder. Når situationen skal nærme sig virkeligheden bliver man ofte nødt til at ty til numeriske metoder.

### Løsningerne

Jeg har løst følgende system ved hjælp af Maple.  $V = 15$  og  $L = 1$ . Løsningerne giver energierne

$$E_1 = 2,60 \quad \text{og} \quad E_2 = 9,73$$

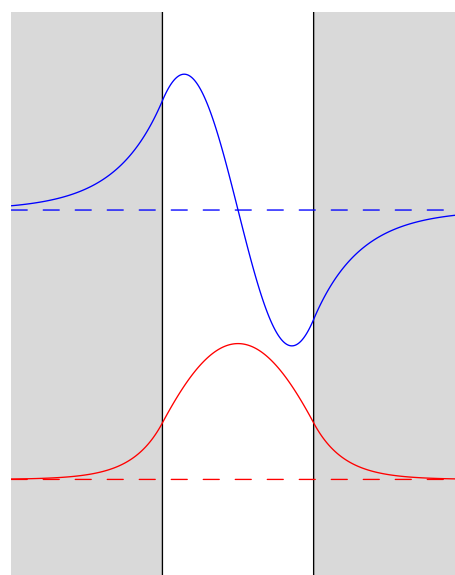
Bølgefunktionerne kan efterfølgende normaliseres ved, at man bestemmer en konstant, så

$$\int_{-\infty}^{\infty} U(x)^2 dx = 1$$

Normaliseringen af bølgefunktionerne kan være en fordel, hvis man vil lave linearkombinationer af tilstandene. Løsningernes normaliserede bølgefunktioner ses grafisk i figur 2.

De bundne tilstand strækker sig nu ind i det forbudte område, men minder dog stadig om løsninger i den uendelige kvantemekaniske brønd.

- Femte didaktiske gevinst. Selv om den uendelige brønd er længere væk fra et fysisk system end den endelige brønd, så er løsningerne kvalitativt de samme. Formen af funktionerne er stadig overordnet set den samme. Et fysisk system kan tilnærmes med et ideelt system med løsninger, der kvalitativt er de samme. Idealiserede løsninger kan bruges til kvalitative modeller for fysiske systemer. Hydrogenatomets



Figur 2

De bundne tilstande i den endelige kvantemekaniske brønd.

bølgefunktioner kan kvalitativt bruges til at beskrive større atomer med flere elektroner.

- Sjette didaktiske gevinst. Den uendelige brønd har uendeligt mange løsninger, mens den endelige, mere fysiske brønd har et begrænset antal tilstande. Hvor mange afhænger naturligvis af dybden og bredden af brønden. Dette kan overføres til harmoniske oscillatorer ift. anharmoniske oscillatorer. Den harmoniske oscillator har et uendeligt antal tilstande, mens anharmoniske oscillatorer ofte har et begrænset antal tilstande. Atomer er lidt specielle, da tilstandene nærmer sig hydrogentilstande, når  $n$  bliver stor – de såkaldte rydbergtilstande.

### Den endelige brønd som model for atomare orbitaler

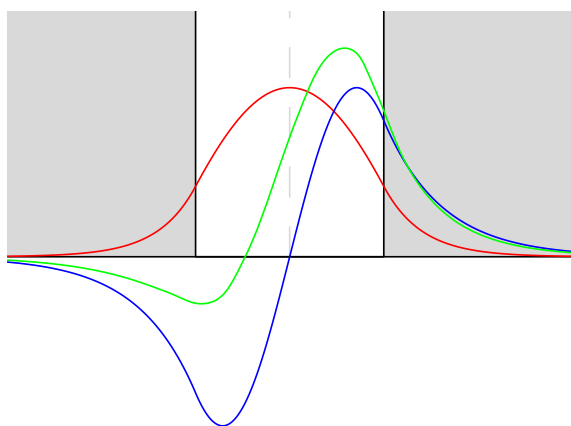
Grundtilstanden med symmetriske fordeling omkring midten minder kvalitativt om en  $s$ -orbital, mens den antisymmetriske exciterede tilstand med knude i midten minder kvalitativt om en  $p$ -orbital.

Det skal dog bemærkes, at eftersom betegnelserne  $s$  og  $p$  angiver det kvantiserede baneimpulsmoment,  $L$ , giver det ikke helt mening i det endimensionelle tilfælde.

Når man har nogle modeller af atomare orbitaler, kan man også begynde at arbejde med dem, som man gør i kemiundervisningen. Det første jeg vil vise er *hybridorbitaler*. Ud fra grundtilstanden,  $s$ , og den exciterede tilstand,  $p$ , kan man konstruere en  $sp$ -hybridorbital

$$U_{sp} = \frac{1}{\sqrt{2}}(U_1(x) + U_2(x))$$

Hybridorbitalen vises i figuren herunder sammen med de to orbitaler, som den er konstrueret ud fra.



Figur 3

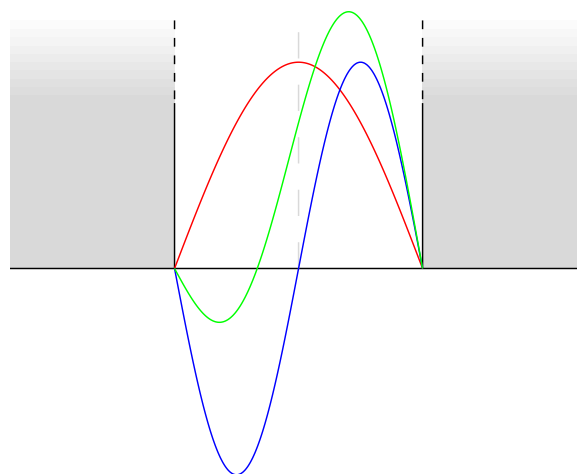
En  $sp$ -hybridorbital tegnet med grøn og de orbitaler, som den er konstrueret af; en  $s$ -orbital (grundtilstanden) tegnet med rødt og en  $p$ -orbital (den exciterede tilstand) tegnet med blå.

Hybridorbitalen viser igen egenskaber, der kvalitativt kan overføres til rigtige atomare hybridorbitaler.

- Syvende didaktiske gevinst. Hybridorbitalen har nu mistet sin symmetri, men består nu af to "buge", en stor og en lille. Knuden findes nu ikke længere i midten af potential. Knuden er forskudt en smule til venstre, over i den store bug. I atomare  $sp$ -orbitaler er knuden heller ikke placeret ved atomkernen, men forskudt en smule ud mod den lille bug, altså omvendt i forhold til brøndens hybridorbital.
- Ottende didaktiske gevinst. Hybridorbitalerne er blot linearkombinationer, summer, af de oprindelige orbitaler. Dette er måske ikke så nyt for eleverne, men jeg finder det meget

mere åbenlyst i 1 dimension, hvor man også kender de ikke-hybridiserede orbitaler.

Hybridorbitalerne kan naturligvis også konstrueres ud fra løsningerne i den uendelige brønd, men løsningerne mister noget af deres overordnede lighed med de atomare orbitaler.



Figur 4

Hybridorbital konstrueret af løsningerne for den uendelige brønd.

I denne artikel har jeg søgt at vise, hvilke udfordringer, man støder på, når ens modeller skal nærme sig virkeligheden, men også at de løsninger man finder, i højere grad stemmer overens med virkeligheden. I næste artikel vil jeg vise, hvordan man kan gå fra den endimensionelle brønd til flere dimensioner, stadig med et fokus på at beskrive ligheder mellem det simple system og den kemiske binding.

## NYHEDER fra Fysikforlaget



### Big Bang – teorien om Universets skabelse

gennemgår Big Bang teorien og Einsteins gravitationsteori og ser på, hvorledes Universets voldsomme udvidelse i de første pikosekunder førte til den ubalance, der skabte galakserne. Nogle af de store mysterier, der fremdeles er uløste i vores forståelse af Universets tilblivelse bliver gennemgået. Udkommer december 2020.

### Fysik i overblik – 8. udgave

har fået tilføjet/ændret enkelte formler, og der er nye afsnit om induceret spændingsfald og fluxændring i spoler. Der er desuden foretaget en opdatering af alle tabelværdier.

### Geovidenskab i overblik – 2. udgave

er især udvidet inden for områder af den geofaglige del af undervisningen i geovidenskab. Der er desuden foretaget en grundig redigering af formler, tekster og illustrationer. Udkommer januar 2021.

