Kvantemekanik og kemiske bindinger 1

Den uendelige kvantemekaniske brønd i én dimension

PALLE JØRGENSEN, Odder Gymnasium

Som fysik– og kemilærer, der under sit studie har beskæftiget sig med atomare og molekylære systemer, har jeg altid haft lyst til at introducere simpel kvantemekanik for mine elever. Og helst på et niveau, hvor det ikke kun er de kvalitative egenskaber ved bølgefunktioner og energiniveauer, der er med i undervisningen.

I coronatiden har jeg haft tid til at studere de muligheder, der ligger i at arbejde med et simpelt kvantemekanisk system, nemlig den kvantemekaniske brønd. Med et CAS–program kan man tilmed udbygge med systemer, der kun kan løses ved numeriske metoder.

I denne artikelserie vil jeg illustrere, hvordan det simple kvantemekaniske system, som den kvantemekaniske brønd er, kan bruges til at lave en beskrivelse af kemiske bindinger, der stikker en smule dybere end blot nogle rumlige figurer af atomare orbitaler. Det er mit håb, at man ved at gå blot en smule mere i dybden med den kvantemekaniske baggrund kan øge elevernes forståelse for atomare og molekylære tilstande og kemiske bindinger.

I de første par artikler, vil jeg vise, hvordan den endimensionelle brønd kan bruges som en simpel model for atomare systemer. I de efterfølgende artikler vil jeg udvide til dels at anvende dobbeltbrønden som model for molekylære systemer, dels at arbejde i 2 og 3 dimensioner.

Schrödingerligningen i 1 dimension

Den tidsuafhængige schrödingerligning for bølgefunktionen U ser ud som følger

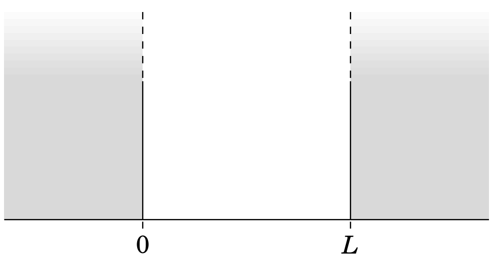
$$-\frac{\hbar^2}{2\cdot m}\cdot\frac{\mathrm{d}^2U}{\mathrm{d}x^2}+V(x)=E\cdot U$$

Regner man i "atomare enheder", dvs. man sætter $m = 1$ og $\hbar = 1$, bliver ligningen nu

$$-\frac{1}{2}\cdot\frac{\mathrm{d}^2U}{\mathrm{d}x^2}+V(x)=E\cdot U$$

Den uendelige brønd

Den uendelige brønd er karakteriseret ved, at der er et område, hvor $V = 0$, mens det alle andre steder er $V = \infty$. Det område, hvor $V = 0$ er tilladt område, både kvantemekanisk og klassisk. I området, hvor $V = \infty$ er forbudt område, både kvantemekanisk og klassisk. I det forbudte område gælder, at $U = 0$.



Figur 1
Den uendelige brønd. For $x > L$ og $x < 0$ er $V = \infty$ og forbudt område. Det tilladte område med $V = 0$ er mellem 0 og L.

Schrödinger-ligningen for den uendelige brønd

I det tilladte område kan bølgefunktionen U findes ved løsning af schrödingerligningen med $V = 0$

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

der også kan omskrives til

$$\frac{\mathrm{d}^2U}{\mathrm{d}x^2}=-2\cdot E\cdot U$$

Eleverne vil måske genkende løsningerne til denne differentialligning, eller også kan man hurtigt vise, at de trigonometriske funktioner er løsninger. Den generelle løsning er på formen

$$U(x)=A\cdot\sin(k\cdot x)+B\cdot\cos(k\cdot x)$$

hvor

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

Forholdet mellem koefficienterne A og B samt de tilladte værdier for E kan findes ved randværdibetingelserne.

- Her har den første didaktiske gevinst. Når løsningerne er sinus– og cosinusfunktioner, er det lettere at forklare, hvorfor der er tale om *bølgefunktioner*.

Randværdibetingelserne ved $x = 0$ for den uendelige brønd giver, at $U(0) = 0$ og dermed

$$A\cdot\sin(0)+B\cdot\cos(0)=0$$

Denne ligning giver $B = 0$.

I den anden side af brønden, $x = L$, får vi $\sin(k\cdot L) = 0$, der giver løsningerne

$$k\cdot L=n\cdot\pi$$

hvor n er et helt tal, og dermed også

$$k_n=\frac{n\cdot\pi}{L}$$

med energien

$$E_n = \frac{k_n^2}{2} = \frac{n^2 \cdot \pi^2}{2 \cdot L^2}$$

- Her kommer den anden didaktiske gevinst. Det er kun løsninger med hele tal n, der er løsninger til systemet. Vi ser altså her en kvantisering af tilstandene.

Den laveste tilstand er for $n = 1$ har $k = \frac{\pi}{L}$ med energien

$$E_1 = \frac{\pi^2}{2 \cdot L^2}$$

Løsning bliver da

$$U_1(x) = A \cdot \sin\left(\frac{\pi \cdot x}{L}\right)$$

Den næstlaveste tilstand fås når $k = \frac{2 \cdot \pi}{L}$ med energien

$$E_2 = \frac{2^2 \cdot \pi^2}{2 \cdot L^2} = \frac{2 \cdot \pi^2}{L^2} = 4 \cdot E_1$$

og generelt har energien for tilstand n

$$E_n = n^2 \cdot E_1$$

Kvantiseringen af energien ses her dog at være af en helt anden karakter end for hydrogenatomet, hvor

$$E_n = \frac{E_1}{n^2}$$

Lige og ulige løsninger

Til at vise den næste pædagogiske pointe ændrer jeg placeringen af potentialet, se figur 2.

At man flytter på x–aksen, ændrer naturligvis ikke på hverken E_n eller k_n.

Det der ændres, er til gengæld ligningen for bølgefunktionerne. Bølgefunktionen for ulige n bliver

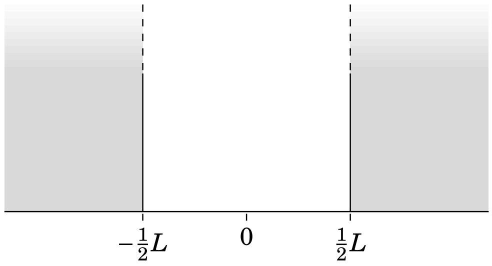
$$U_n(x) = A \cdot \cos(k_n \cdot x)$$

mens bølgefunktionerne for lige n bliver

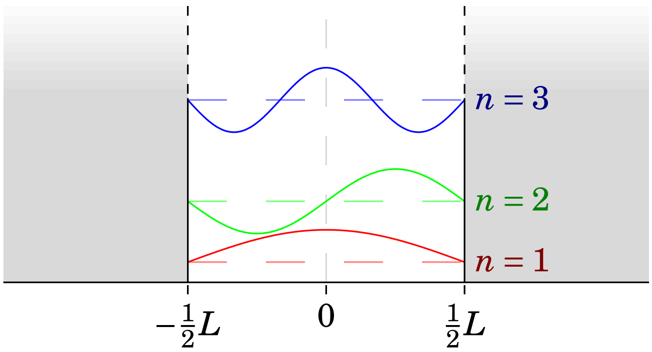
$$U_n(x) = A \cdot \sin(k_n \cdot x)$$

Størrelsen af konstanten A har ingen betydning for hverken løsningen af schrödingerligningen eller energiniveauer.

- Her kommer tredje didaktiske gevinst. Hver anden løsning giver lige bølgefunktioner: $U(-x) = U(x)$. De bliver cosinusfunktioner. Den anden halvdel af løsninger giver ulige bølgefunktioner: $U(-x) = -U(x)$. De bliver sinusfunktioner. Symmetrien er omkring potentialets symmetriske midtpunkt. Tilsvarende symmetrier findes for de atomare orbitaler s og d, der begge er symmetriske (har positiv paritet, $\psi(-\vec{r}) = \psi(\vec{r})$ og p og f, der er antisymmetriske (har negativ paritet, $\psi(-\vec{r}) = -\psi(\vec{r})$.



Figur 2
Den uendelige brønd placeret symmetrisk omkring x = 0. Det tilladte område er mellem –L/2 og L/2.



Figur 3
De tre laveste tilstande i den uendelige brønd. For n = 1 og n = 3 er bølgefunktionerne lige, mens for n = 2 er bølgefunktionen ulige.

I denne artikel har jeg vist, hvordan man kvalitativt kan tilnærme et kompliceret system som eksempelvis hydrogenatomet med en noget simplere system, som eleverne er enten i stand til at løse selv – det er de simplest mulige andenordens differentialligninger – eller i hvert fald genkende løsningerne til. De genkender muligvis den ene af løsningerne fra den klassiske harmoniske oscillator.

Selv om energiniveauerne er meget forskellige, når man sammenligner hydrogenatomet og den uendelige brønd, så er der stadig mange andre aspekter ved løsningerne, der kvalitativt kan overføres til hydrogenatomet.

I næste artikel vil jeg behandle den endelige kvantemekaniske brønd. Der kommer endnu flere didaktiske pointer, og løsningerne kommer endnu tættere på løsningerne for hydrogenatomet.