

Schrödingerekvationen för väteatomen

19 okt. 2026, 5 min läsning

UTKAST

#fysik #atomfysik #modell

Kurs: F0005T **Förkunskaper:** Schrödingerekvationen, Sfäriska koordinater, Bohrs modell för väteatomen

Med Coulombpotentialen separeras problemet i sfäriska koordinater till en produkt av tre enfunktioner. Randvillkoren är att $R(r) \rightarrow 0$ när $r \rightarrow \infty$ och att Θ och Φ är periodiska med 2π . Radialdelen ger samma energinivåer som Bohrs modell, men nu utan postulat – och de två vinkeldelarna ger ytterligare två kvanttal på köpet.

$$U(r) = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r} \quad \psi(r, \theta, \phi) = R(r) \Theta(\theta) \Phi(\phi)$$

Formeln, symbol för symbol

$$U(r) = -\underbrace{\frac{1}{4\pi\epsilon_0}}_{\text{beror bara på avståndet } r} \frac{e^2}{r}$$

$$\psi = \underbrace{R(r)}_{\text{ger } n \text{ och energin}} \underbrace{\Theta(\theta)}_{\text{ger } l \text{ och formen}} \underbrace{\Phi(\phi)}_{\text{ger } m_l \text{ och orienteringen}}$$

Eftersom potentialen bara beror på avståndet går vågfunktionen att dela upp i en faktor per koordinat. Varje faktor får ett eget randvillkor, och varje randvillkor ger ett eget kvanttal.

1. Schrödingerekvationen i tre dimensioner

I tre dimensioner ersätts andraderivatan av summan av de tre partiella andraderivatorna:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} \right) + U\psi = E\psi$$

$|\psi|^2 dV$ är sannolikheten att hitta partikeln i volymelementet dV , och normeringen blir

$$\int |\psi|^2 dV = 1$$

Coulombpotentialen beror bara på avståndet r till kärnan, så det lönar sig att byta till **Sfäriska koordinater**. Fysiken använder θ för vinkeln från z-axeln och ϕ för vinkeln runt z-axeln. I matematikkursen är namnen ofta ombytta.

2. Separation av variabler

Sätt in produkten $\psi = R\Theta\Phi$ från ingressen. Varje term kan då ordnas så att den beror på en enda variabel, och ekvationen delas upp i tre vanliga differentialekvationer. Separationskonstanterna skrivs m_l^2 och $l(l+1)$.

Azimutdelen.

$$\frac{d^2\Phi}{d\phi^2} = -m_l^2 \Phi$$

Polardelen.

$$\frac{1}{\sin\theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin\theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) + \left(l(l+1) - \frac{m_l^2}{\sin^2\theta} \right) \Theta = 0$$

Radialdelen.

$$-\frac{\hbar^2}{2m_r r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \left(\frac{l(l+1)\hbar^2}{2m_r r^2} + U(r) \right) R = ER$$

Här är m_r den reducerade massan, se avsnitt 3. Termen $l(l+1)\hbar^2/2m_r r^2$ är rotationsenergin $L^2/2m_r r^2$ med $L^2 = l(l+1)\hbar^2$. Den verkar som en extra potential som håller elektronen borta från kärnan när $l > 0$.

Hur randvillkoren ger heltal

Azimutdelen. Lösningen är

$$\Phi(\phi) = e^{im_l \phi}$$

Vinkeln $\phi + 2\pi$ är samma punkt som ϕ , så $\Phi(\phi + 2\pi) = \Phi(\phi)$:

$$e^{im_l 2\pi} = 1 \quad \implies \quad m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

Polardelen. Lösningarna är ändliga i både $\theta = 0$ och $\theta = \pi$ bara om l är ett heltal med $l \geq |m_l|$.

Radialdelen. $R(r) \rightarrow 0$ när $r \rightarrow \infty$ bara för vissa energier. De kan numreras med ett heltal $n > l$, och energin beror bara på n .

Tre randvillkor ger alltså tre **kvanttal**, utan att något behöver postuleras.

3. Energinivåerna

Radialekvationen ger precis samma energinivåer som **Bohrs modell för väteatomen**, $E_n = -13,60 \text{ eV}/n^2$. Två saker skiljer:

- **Inget postulat.** Bohr fick kvantiseringen genom att anta $L = n\hbar$. Här följer den ur randvillkoren. Grundtillståndet har dessutom $L = 0$, vilket Bohrs modell inte tillåter.
- **Reducerad massa.** Kärnan är inte oändligt tung, så elektronens massa ersätts med **den reducerade massan** m_r . Det ändrar energierna med ungefär 0,05 %.

Energien beror bara på n , inte på l eller m_l . Varje nivå rymmer därför flera tillstånd med samma energi, n^2 stycken om spinnet inte räknas (se **Kvanttal**). Med **Elektronspin** blir det $2n^2$.

4. Var elektronen finns

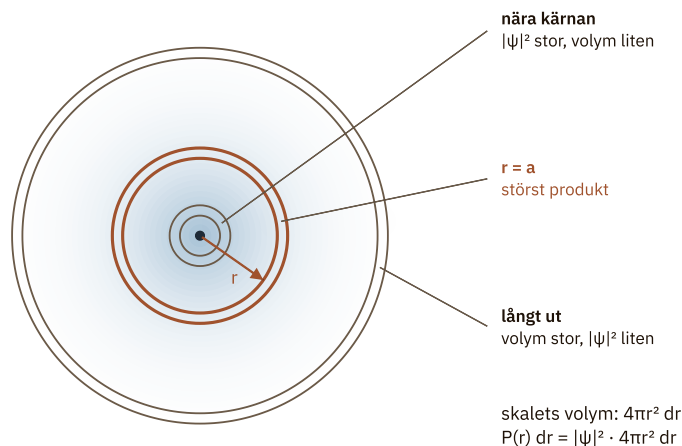
Grundtillståndet, $1s$, är sfäriskt symmetriskt:

$$\psi_{1s}(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-r/a}$$

där $a = 5,29 \cdot 10^{-11} \text{ m}$ är Bohrradien. $|\psi_{1s}|^2$ är störst i kärnan, men volymen där är liten.

Sannolikheten att hitta elektronen mellan r och $r + dr$ får man genom att multiplicera med ett tunt sfäriskt skals volym, $4\pi r^2 dr$:

$$P(r) dr = 4\pi r^2 |\psi|^2 dr$$



Varför $P(r)$ har ett maximum. Sannolikheten att hitta elektronen i ett tunt skal är $|\psi|^2$ gånger skalets volym $4\pi r^2 dr$. Nära kärnan är $|\psi|^2$ störst men skalet litet, och långt ut är skalet stort men $|\psi|^2$ nästan noll. För $1s$ blir produkten störst vid Bohrradien a .

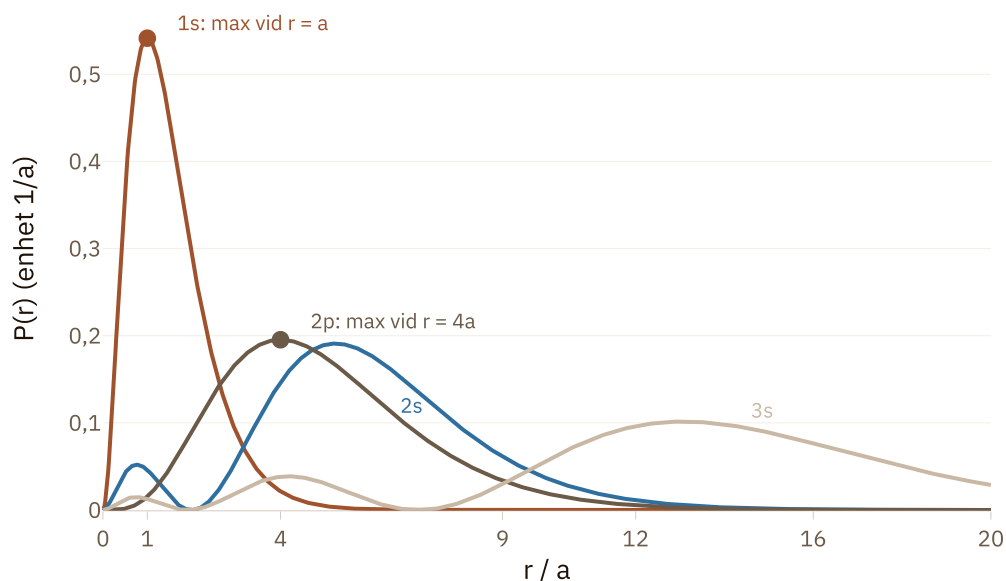
För ett tillstånd som inte är sfäriskt symmetriskt integrerar man först bort vinklarna, och då blir $P(r) = r^2 R_{nl}^2$.

Mest sannolika avståndet. För $1s$ är

$$P(r) = \frac{4r^2}{a^3} e^{-2r/a}$$

Derivatan är noll när $2r - 2r^2/a = 0$, alltså vid $r = a$. Det mest sannolika avståndet är Bohrradien, men elektronen har ingen bestämd bana. Medelavståndet är $1,5a$.

För tillstånd med $l = n - 1$ ($1s$, $2p$, $3d$, ...) har $P(r)$ en enda topp vid $r = n^2 a$, samma radier som i Bohrs modell. Tillstånd med lägre l har radiella noder, sfärer där $P(r) = 0$.



Radiell sannolikhetsstäthet för fyra tillstånd i väte. 1s och 2p har en enda topp, vid a och $4a$. 2s har en nod vid $2a$, och 3s har två noder.

⚠ Vanliga fel

- $|\psi|^2$ tas för $P(r)$. $|\psi_{1s}|^2$ är störst i $r = 0$, men $P(r)$ är noll där. Faktorn $4\pi r^2$ glöms lätt.
- Massan m och kvanttalet m_l blandas ihop. Massan i radialekvationen har inget med magnetiska kvanttalet att göra.
- Energin tros bero på l . I väte beror E_n bara på n , så 2s och 2p har samma energi. I atomer med flera elektroner gäller det inte längre.
- Vinkelnamnen byts. Här är θ polvinkeln och ϕ azimutvinkeln.
- $n = 0$. Huvudkvanttalet börjar på 1.

5. Lösta exempel

☰ Exempel – Långt ut och nära kärnan i grundtillståndet

En väteatom är i grundtillståndet 1s.

a) Beräkna sannolikheten att elektronen befinner sig längre än $2a$ från kärnan. b) Beräkna sannolikheten att den befinner sig närmare kärnan än a . c) Vilket är det mest sannolika avståndet, i meter?

✎ Lösning

Radiell täthet.

$$P(r) = 4\pi r^2 \cdot \frac{1}{\pi a^3} e^{-2r/a} = \frac{4r^2}{a^3} e^{-2r/a}$$

Byt variabel. Sätt $u = 2r/a$, så att $r = au/2$ och $dr = a du/2$:

$$P(r) dr = \frac{4}{a^3} \cdot \frac{a^2 u^2}{4} \cdot e^{-u} \cdot \frac{a}{2} du = \frac{1}{2} u^2 e^{-u} du$$

Med partialintegration är en primitiv funktion till $u^2 e^{-u}$

$$-(u^2 + 2u + 2)e^{-u}$$

a) Utanför $2a$. Gränsen $r = 2a$ motsvarar $u = 4$:

$$P(r > 2a) = \frac{1}{2} (16 + 8 + 2) e^{-4} = 13e^{-4} \approx \boxed{0,238}$$

b) Innanför a . Gränsen $r = a$ motsvarar $u = 2$:

$$P(r < a) = \frac{1}{2} (2 - (4 + 4 + 2) e^{-2}) = 1 - 5e^{-2} \approx \boxed{0,323}$$

Elektronen är alltså oftare utanför Bohrradien än innanför.

c) Mest sannolikt avstånd. $dP/dr = 0$ ger $r = a$:

$$r_{\max} = a = \boxed{5,29 \cdot 10^{-11} \text{ m}}$$

Fysika: $Te (a_0)$

Ej kontrollerat mot facit – två oberoende lösningar stämmer överens.

Läsning

- 41.1 The Schrödinger Equation in Three Dimensions
- 41.3 The Hydrogen Atom