# Usikkerhedsrelationen og Bohrradius
## – breddeopgave 74 og 75 med didaktisk kommentar

*Af Jens Højgaard Jensen, IMFUFA, INM, RUC.*

*Mit formål med artikelserien om breddeopgaver er – udover at gøre opmærksom på RUCs fysikuddannelse – dobbelt: Dels udvælger jeg opgaverne, så de kan have interesse som fysikproblemer i egen ret. Dels udvælger jeg dem med henblik på at kunne knytte didaktiske overvejelser til dem af interesse for fysikundervisere. I første omgang i forhold til universitetsundervisning. Men i anden omgang kunne der måske også trækkes paralleller til andre undervisningsniveauer.*

Her bringes løsning og kommentar til opgaverne fra KVANT 2017 nr. 3 samt en ny opgave. De seneste opgaver var Breddeopgaver 74 og 75:

### Usikkerhedsrelationen og Bohrradius

*Synes det ræsonnabelt at forestille sig neutronen som opbygget af en elektron og en proton holdt sammen af elektrostatiske kræfter? Begrund svaret.*

*Efter Rutherfords opdagelse af, at atomer ikke er kompakte, men består af tomt rum med en positiv ladet kerne af meget ringe udstrækning og derom kredsende elektroner med endnu mindre udstrækning (må man forestille sig), fremstår det som en gåde, at stof ikke kollaberer ved, at elektronerne trækkes ind til deres kerner, således at atomerne skrumper ind. Hvorfor sker det ikke? Begrund svaret.*

### Løsning

Lad os fokusere på det simpleste atom, brintatomet. Hvorfor kollaberer det ikke? Et semiklassisk svar herpå kunne se sådan ud:

En elektron, der bevæger sig omkring en proton, har potentiel energi $E_{\text{pot}}$ og kinetisk energi $E_{\text{kin}}$.

Ifølge Coulombs lov er elektronens potentielle energi givet ved $E_{\text{pot}}(r) = -e^2/(4\pi\varepsilon_0 r)$, hvis vi sætter $E_{\text{pot}}$ til nul, når elektronen er uendelig langt fra protonen. Her er $\varepsilon_0$ dielektricitetskonstanten i vakuum, $e$ elektronens og protonens ladning og $r$ afstanden imellem elektronen og protonen.

Elektronens kinetiske energi er ikke givet som en funktion af $r$, som det er tilfældet for dens potentielle energi. På grund af usikkerhedsrelationen kan vi imidlertid i grove træk vurdere en mindste kinetisk energi, $E_{\text{kin,min}}$, som er en funktion af $r$:

Hvis vi tænker os, at elektronen befinder sig inden for en kugleskal i afstanden $r$ fra protonen, så er størrelsesordenen af usikkerheden på dens positionsbestemmelse i f.eks. $x$-retningen, $\Delta x$, mindre end $r$: $\Delta x < r$. Heisenbergs usikkerhedsrelation kan skrives: $m_e \Delta v_x \Delta x \geq h/4\pi$, hvor $m_e$ er elektronens masse, $\Delta v_x$ er usikkerheden på hastigheden $v_x$ i $x$-aksens retning, og $h$ er Plancks konstant. Heraf ses, at $\Delta v_x$, og dermed elektronens kinetiske energi, ikke kan være nul, medmindre $\Delta x$ er uendelig. Definerer vi $\Delta v_x$ som kvadratroden af middelværdien af kvadratafvigelserne imellem $v_x$ og middelværdien af $v_x$, $\Delta v_x = \sqrt{< v_x^2 - < v_x >^2 >}$, er $\Delta v_x^2$ her lig med middelværdien af $v_x^2$, fordi middelværdien af $v_x$ af symmetrigrunde er nul. Af samme grund er $< v_x^2 + v_y^2 + v_z^2 > = 3 < v_x^2 >$. Som konsekvens af usikkerhedsrelationen har vi alt i alt for middelværdien af den kinetiske energi for elektroner inden for kugleskallen:

$$< E_{\text{kin}} > = \frac{3}{2} m_e < v_x^2 > = \frac{3}{2} m_e \Delta v_x^2. \tag{1}$$

Dermed har vi

$$< E_{\text{kin}} > \geq \frac{3 m_e h^2}{2(4\pi m_e \Delta x)^2}. \tag{2}$$

Hvis vi tænker os, at elektronen befinder sig inden for en kugleskal omkring protonen med radius r, dvs $\Delta x \approx r$, så må vi ifølge usikkerhedsrelationen altså gå ud fra, at den i gennemsnit mindst har den kinetiske energi:

$$E_{\text{kin,min}} \approx \frac{3h^2}{32\pi^2 m_e r^2} \tag{3}$$

Benytter vi overslagsmæssigt elektronens potentielle energi i afstanden $r$ fra kernen som tilnærmelse for dens gennemsnitlige potentielle energi inden for kugleskallen, har vi for den minimale totalenergi som funktion af $r$:

$$E_{\text{tot,min}}(r) \approx \frac{-e^2}{4\pi\varepsilon_0 r} + \frac{3h^2}{32\pi^2 m_e r^2}. \tag{4}$$

Funktionen $E_{\text{tot,min}}(r)$ har et minimum for $r = r_0$ givet ved:

$$r_0 = \frac{3h^2\varepsilon_0}{4\pi m_e e^2}. \tag{5}$$

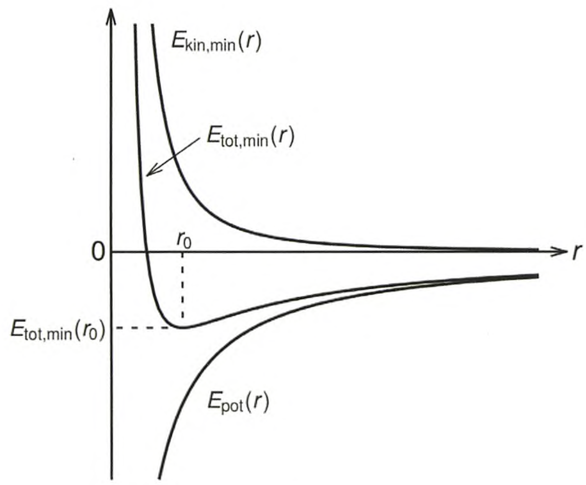
Det findes ved differentiation af $E_{\text{tot,min}}(r)$. Indsættelse af $r_0$, givet ved ligning (5), i ligning (4), giver herefter:

$$E_{\text{tot,min}}(r_0) = -\frac{m_e e^4}{6(h\varepsilon_0)^2}. \tag{6}$$

At $r_0$ repræsenterer et minimum, og ikke et maksimum, ses af, at $E_{\text{tot,min}}(r_0)$ er negativ og dermed mindre end nul, som er energien, når elektronen er i hvile uendeligt langt fra protonen. For at øge $r$ fra $r_0$ til uendelig skal der tilføres energien $-E_{\text{tot,min}}(r_0)$. Der skal også tilføres energi for at ændre $r$ fra $r_0$ til mindre værdier af $r$. I ligning (4) er det det andet og positive led proportionalt med $r^{-2}$, der ender med at dominere over det første og negative led proportionalt med $r^{-1}$, når $r$ går imod nul. $-E_{\text{tot,min}}(r)$ går derfor imod plus uendeligt, når $r$ går imod nul. Det kræver tilførsel af energi at ændre $r$ fra $r_0$ til noget andet både i opadgående og nedadgående retning. Derfor repræsenterer $r = r_0$ den stabile konfiguration af elektron/proton parret. Situationen minder om et potentialminimum, hvor $E_{\text{pot}}(r)$ repræsenterer en tiltrækkende kraft, og $E_{\text{kin,min}}(r)$ repræsenterer en frastødende kraft, som ophæver hinanden for $r = r_0$. Men "frastødningen"skyldes altså ikke en kraft. Den skyldes usikkerhedsrelationen.

Bortset fra talfaktorerne kendes resultaterne i ligningerne (5) og (6) som henholdsvis Bohr radius og brintatomets bindingsenergi. I stedet for Bohrs postulater har vi benyttet usikkerhedsrelationen.

Svaret på den anden opgave er da: Usikkerhedsrelationen er grunden til, at atomer ikke kollaberer. Den medfører en minimal kinetisk energi ("nulpunktsenergien"), der i udregningerne indgår svarende til, at der var en frastødende kraft ved siden af den tiltrækkende Coulomb kraft, således at de to ophævede hinanden i en afstand karakteristisk for atomernes størrelse. Det tilsvarende "potentialminimum"er vist på figur 1.




**Figur 1.** "Potentialminimum" for brintatomet.

Svaret på den første opgave er: Det synes ikke rimeligt at forestille sig neutronen som en elektron og en proton holdt sammen af elektrostatiske kræfter. Den stabile tilstand for en elektron og en proton alene holdt sammen af elektrostatiske kræfter er som udledt brintatomet med en radius, der er $10^5$ gange så stor som neutronens radius. Der skal altså mere end usikkerhedsrelationen og elektrostatiske kræfter til at give neutronen dens størrelse.

## Kommentar

Den semiklassiske udledning her af Bohr radius ved hjælp af usikkerhedsrelationen giver som sagt samme resultat som Bohrs model af brintatomet, bortset fra en talfaktor af størrelsesorden nær 1. Den kvantemekaniske udregning ved brug af Schrödingerligningen giver samme resultat som Bohrs. Overensstemmelsen imellem de tre udregninger er ikke overraskende. Alle tre udregninger har $e^2/(4\pi\varepsilon_0)$, $m_e$ og $h$ som de indgående parametre i udregningerne. Og en dimensionsanalyse viser, at $r_0$ givet ved ligning (5),bortset fra talfaktoren, er den eneste måde, som en hvilken som helst model eller teori, baseret på disse tre inputparametre, kan levere en karakteristisk længde på (jf. breddeopgave 68, KVANT, marts 2016).

På kurserne i Fysisk problemløsning I og Fysisk problemløsning II på RUC, som breddeopgaverne er knyttet til, underviser vi ikke i kvantemekanik som matematisk formuleret teori. Det sker på et decideret kvantemekanikkursus. På Fysisk problemløsning II kurset nøjes vi, udover Bohrs atommodel, med en mere kvalitativ indgang til kvantefysik. I hovedsagen præsenteres kvantemekanik som afvigende fra klassisk mekanik på tre punkter: Kvantiseringen af fysiske størrelser, usikkerhedsrelationen og partiklers uskelnelighed (Pauliprincippet). Det er i denne undervisningssammenhæng breddeopgaverne her om usikkerhedsrelationen og Bohrradius skal forstås.

På den ene side kan Bohrradius udregnes fra Bohrs model for brintatomet. På den anden side kan den udregnes fra Schrödingerligningen. Ingen af de to udregninger giver den kvalitative forståelse af, hvorfor stof ikke kollaberer, som udregningen her gør det. Bohrs model rummer ikke usikkerhedsrelationen, og Schrödingerligningen rummer den kun implicit. Som supplement og/eller introduktion til den eksakte kvantemekanik håber vi at støtte de studerendes kvalitative forståelse af kvantemekanik ved på Fysisk problemløsning II kurset at stille opgaver, der inviterer til at benytte kvantiseringen af fysiske størrelser, usikkerhedsrelationen, og/eller Pauliprincippet direkte som tilfældet er ved løsningen her af breddeopgave 74 og 75.

Angrebsmåden oven for kan minde om situationer i kemi. Det kan være hensigtsmæssigt at tænke i kvalitative billeder som ion-bindingen og den kovalente binding. Og med ion-bindingen at tænke på en frastødning og en tiltrækning, der ophæver hinanden i et potentialminimum. Imidlertid skyldes "frastødningen"i ion-bindingen ikke en kraft, men kvantisering, usikkerhedsrelation og Pauliprincip. I tilfældet kovalent binding skyldes både frastødning og tiltrækning kvantisering, usikkerhedsrelation og Pauliprincip. Helt principielt kan man ikke tale om de to bindinger som af forskellig slags. Det er samme fysik, der i princippet kan forklare både ion-bindingen og den kovalente binding (og bindinger derimellem), Coulombs lov og Schrödingerligningen. Alligevel er de kvalitative billeder, som er det, de to bindingstyper er, helt nødvendige i kemisk tankegang.

## Breddeopgave 76. Opdrift på flyvinge

Inden næste nummer af KVANT udkommer, kan læserne eventuelt overveje løsningen til denne opgave fra breddekurset på RUC (fra samlingen af træningsopgaver ved starten af "Breddekursus", nr. 76 i rækken her i KVANT):

*Hvorfor er vingen på en flyvemaskine mere buet på oversiden end på undersiden?*

Løsning og kommentar bringes i næste nummer af KVANT.