

Oppgave 1 a) Når $-\frac{L}{2} \leq x \leq \frac{L}{2}$ er løsningene på Sch.l. $-\frac{\hbar^2}{2m} \psi'' = E\psi$
 $\cos kx$ eller $\sin kx$, med $2mE/\hbar^2 = k^2$.
 Med $x > L/2$ blir Sch.l. $-\frac{\hbar^2}{2m} \psi'' = (E - V_0)\psi = -\frac{\hbar^2 k^2}{2m} \psi$,
 altså: $\psi'' = k^2 \psi$ med løsninger $\psi = e^{\pm kx}$. Bare
 minus-tegnet er akseptabelt når $\int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi|^2 < \infty$
 Tilsvarende, når $x < -L/2$: $\psi = e^{+kx}$.
 Like paritet gir da

$$\psi(x) = \begin{cases} a e^{+kx} & x \leq -L/2 \\ b \cos kx & -L/2 \leq x \leq L/2 \\ a e^{-kx} & x \geq L/2 \end{cases} \quad \text{gcd.}$$

a, b konstanter

$$\psi(-x) = \psi(x) \quad \text{eller} \quad \psi(-x) = -\psi(x)$$

↑ like paritet ↑ odde paritet

I dette potensialet må $E < V_0$ for alle bundne tilstander. Definer: k, k_0 og K ved:

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad ; \quad V_0 = \frac{\hbar^2 k_0^2}{2m} \quad ; \quad V_0 - E = \frac{\hbar^2 K^2}{2m} \quad ; \quad (K^2 = k_0^2 - k^2)$$

b) Tilsvarende: Odde paritet må ha formen

$$\psi(x) = \begin{cases} -c e^{+kx} \\ d \sin kx \\ +c e^{-kx} \end{cases} \quad c, d \text{ konstanter.}$$

c) Like paritet. Grenseb. ved $x = L/2$ (de ved $x = -L/2$ der symmetri grunner med nødvendighet gi samme betingelser):

$$\psi\left(\frac{L}{2}\right) = a e^{-KL/2} = b \cos \frac{kL}{2}$$

$$\psi'\left(\frac{L}{2}\right) = -Ka e^{-KL/2} = -kb \sin \frac{kL}{2}$$

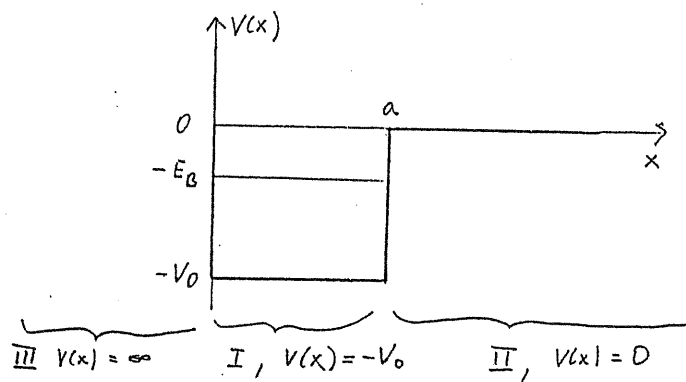
Divider siste likning med første:

$$\tan \frac{kL}{2} = \frac{K}{k} \quad \text{gcd.}$$

d) Odde paritet:

$$\left. \begin{aligned} \psi\left(\frac{L}{2}\right) &= c e^{-KL/2} = d \sin \frac{kL}{2} \\ \psi'\left(\frac{L}{2}\right) &= -Kc e^{-KL/2} = kd \cos \frac{kL}{2} \end{aligned} \right\}$$

$$\tan \frac{kL}{2} = -\frac{k}{K}$$



Vi studerer her bundne tilstande, dvs.
 $E = -E_B$ der $0 < E_B < V_0$

I område I blir de Schrödingerligningen:

$$\psi'' = -\frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E_B) \psi$$

$$\equiv -k^2 \psi$$

(1)

der:

$$k = \left(\frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E_B) \right)^{1/2}$$

(2)

med generell løsning:

$$\psi_I(x) = C_1^I \sin(kx) + C_2^I \cos(kx)$$

(3)

I område II blir Schrödingerligningen:

$$\psi'' = \frac{2mE_B}{\hbar^2} \psi \equiv \kappa^2 \psi \quad (4)$$

der:

$$\kappa = \left(\frac{2mE_B}{\hbar^2} \right)^{1/2} \quad (5)$$

med generell løsning:

$$\psi_{II}(x) = C_1^I e^{-\kappa x} + C_2^I e^{\kappa x} \quad (6)$$

Randkrav:

i) Kravet om kvadratisk integrerbarhet

gir:

$$\psi(x \rightarrow \infty) \rightarrow 0 \quad (7)$$

$$\Rightarrow C_2^I = 0$$

ii) Fra punkt 3.1. i forelesningene

har vi at $\psi(x) = 0$ når $\psi(x) = \infty$

Dette sammen med at $\psi(x)$ må

være kontinuerlig, gir:

$$\psi(0) = 0 \quad (8)$$

$$\Rightarrow C_1^I = 0$$

Vi står da igjen med:

$$\psi_I(x) = C_1^I \sin(kx) \quad (9)$$

$$\psi_{II}(x) = C_1^I e^{-\kappa x} \quad (10)$$

Fra pkt. 3.1. i forelesningen har vi også skjøtingsbetingelsene:

$$\psi_I(a) = \psi_{II}(a) \quad (11)$$

og:

$$\psi_I'(a) = \psi_{II}'(a) \quad (12)$$

som gir:

$$C_1^I \sin(ka) = C_1^I e^{-\kappa a} \quad (13)$$

og:

$$k C_1^I \cos(ka) = -\kappa C_1^I e^{-\kappa a} \quad (14)$$

(14) dividert med (13) gir:

$$k \cotan(ka) = -\kappa \quad (15)$$

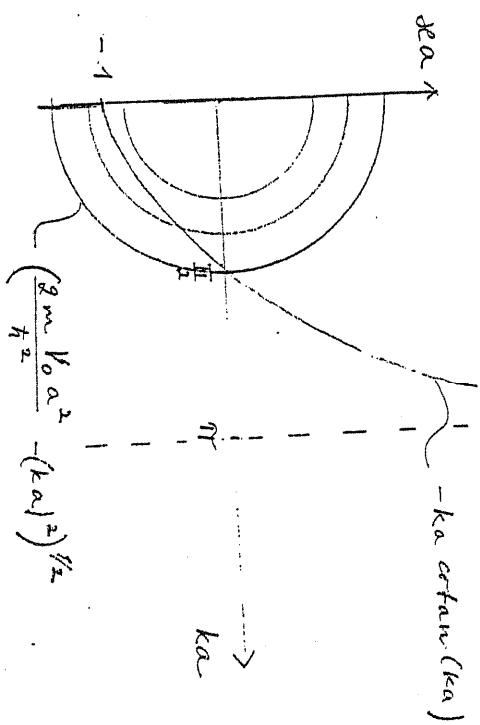
og videre ved hjelp av lign. (9) og (5):

$$\kappa a = -ka \cotan(ka)$$

$$= \left(\frac{2mV_0 a^2}{\hbar^2} - (ka)^2 \right)^{1/2} \quad (16)$$

Vi har her to uttrykk for κa som i prinsipp bestemmer hvilke verdier for k (og dermed for E_B) som er løsninger for dette problemet. Vi kan imidlertid ikke finne eksplisitte uttrykk analytisk for disse E_B -verdiene.

Vi kan imidlertid fremstille begge uttrykk for ϵa grafisk s.f.a. ka og på den måten finne løsningen på vår oppgave. Vi merker oss da at både ϵa og ka er positive (se lign. (2) og (5)) og at det siste uttrykket for ϵa i lign. (17) representerer en sirkel med radius $\left(\frac{2mV_0 a^2}{\hbar^2}\right)^{1/2}$. Vi får da følgende skisse:



I skissen illustrerer de forskjellige kasusirklene forskjellige verdier for m . Vi ser at vi bare kan få løsning av lign. (16) for positive ϵa og ka (dvs. for bundne tilstander).

dersom:

$$\left(\frac{2mV_0 a^2}{\hbar^2}\right)^{1/2} > \frac{\pi}{2}$$

sum gir:

$$m > \frac{\pi^2 \hbar^2}{2} \quad (17)$$

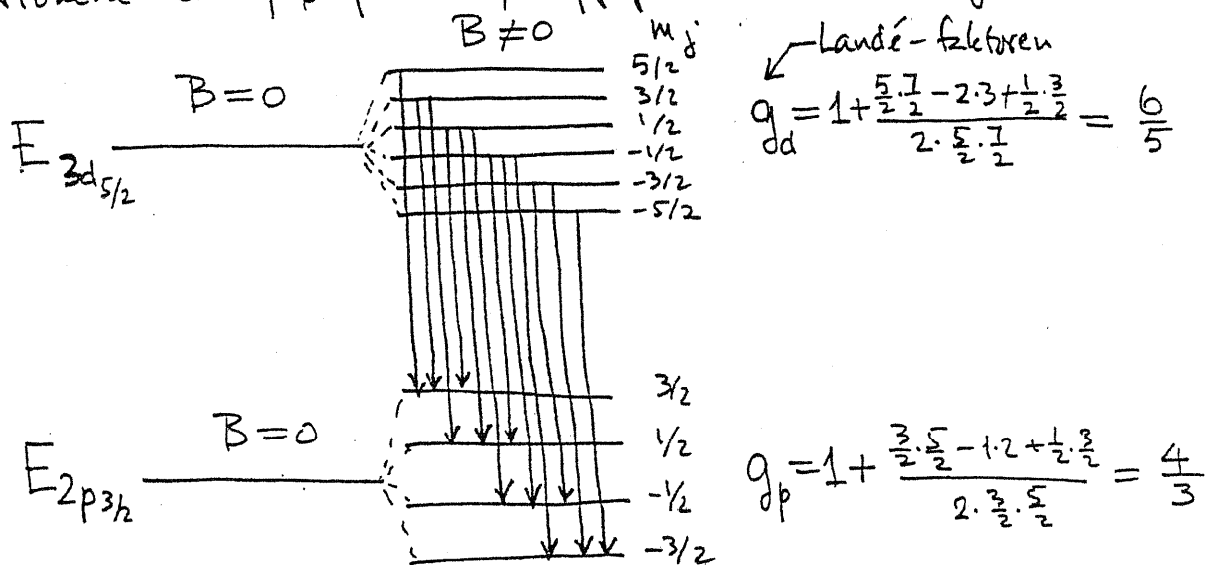
Oppgave 2

- a) I denne oppgaven skal vi anvende Landé's g-faktor

$$g = 1 + \frac{j(j+1) - l(l+1) + s(s+1)}{2j(j+1)}$$

til å se på oppsplittingen som et $\vec{B}$ -felt gir av linjen som følger av den elektriske dipolovergangen $3d_{5/2} \rightarrow 2p_{3/2}$. Utvalgsregelen $\Delta l = \pm 1$ er åpenbart oppfylt når $d \rightarrow p$ ($l=2 \rightarrow l=1$). Og $\Delta j = \frac{3}{2} - \frac{5}{2} = -1$ er også OK for el. dipol overgang. Dessuten har vi regelen $\Delta m_j = 0, \pm 1$.

- b) Nivåene blir, skjematisk, oppsplittet som følger



Energiforskyvningen relativt energidifferansen mellom nivåene i $B=0$ er

$$\Delta E = \mu_B B [g_d(m_j)_{\text{før}} - g_p(m_j)_{\text{etter}}]$$

Dvs:

Δm_j	$\frac{5}{2} \rightarrow \frac{3}{2}$	$\frac{3}{2} \rightarrow \frac{3}{2}$	$\frac{3}{2} \rightarrow \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2} \rightarrow \frac{3}{2}$	$\frac{1}{2} \rightarrow \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2} \rightarrow -\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2} \rightarrow \frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2} \rightarrow -\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2} \rightarrow -\frac{3}{2}$	OSV.
$\Delta E / \mu_B B$	1	$-\frac{1}{5}$	$\frac{17}{15}$	$-\frac{7}{5}$	$-\frac{1}{15}$	$\frac{19}{15}$	$-\frac{19}{15}$	$\frac{1}{15}$	$\frac{7}{5}$	

Alle 12 mulighetene gir forskjellige energiforskyvninger.

Altså: 12 linjer er resultatet når $3d_{5/2} \rightarrow 2p_{3/2}$ overgangen utsettes for et magnetfelt!

Oppgave 3

a Ortogonalitet: Med $\int d\Omega \equiv \int_{-\pi}^{\pi} d\varphi \int_0^{\pi} d\theta \sin\theta$ har en

$$\int d\Omega p_x^* p_z = \frac{1}{\sqrt{2}} \int d\Omega (-Y_{11}^* Y_{10} + Y_{1-1}^* Y_{10}) = 0$$

Dette må være null siden Y_{lm} alle er ortogonale.
Helt tilsvarende må p_y & p_z være ortogonale.

$$\int d\Omega p_x^* p_y = \frac{i}{2} \int d\Omega (-|Y_{11}|^2 - Y_{11}^* Y_{1-1} + Y_{1-1}^* Y_{11} + |Y_{1-1}|^2)$$

Kryssliddene gir null av samme grunn som for,
mens diagonalliddene blir hverandre i hjel, siden
alle Y_{lm} er normert til 1: $\int d\Omega |Y_{lm}|^2 = 1$.

Normering

$$\begin{aligned} \int d\Omega |p_x|^2 &= \frac{1}{2} \int d\Omega (|Y_{11}|^2 - Y_{11}^* Y_{1-1} - Y_{1-1}^* Y_{11} + |Y_{1-1}|^2) \\ &= \frac{1}{2} (1+1) = 1. \end{aligned}$$

og tilsvarende for p_y :

$$\int d\Omega |p_y|^2 = \frac{1}{2} \int d\Omega (|Y_{11}|^2 + Y_{11}^* Y_{1-1} + Y_{1-1}^* Y_{11} + |Y_{1-1}|^2) = 1$$

Tilslutt

$$\begin{aligned} p_x &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin\theta e^{i\varphi} + \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin\theta e^{-i\varphi} \right) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \sin\theta \frac{1}{2} (e^{i\varphi} + e^{-i\varphi}) \\ &= \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \sin\theta \cos\varphi \end{aligned}$$

$$p_y = \frac{i}{\sqrt{2}} \left(-\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin\theta e^{i\varphi} + \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin\theta e^{-i\varphi} \right) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \sin\theta \sin\varphi$$

Men $(\sin\theta \cos\varphi, \sin\theta \sin\varphi, \cos\theta)$ er nettopp x, y & z -komponentene av en vilkårlig enhetsvektor og p_x, p_y, p_z har derfor samme symmetri som absne x, y, z .

som med rimelig tilnærming kan identifiseres
med H-tilstanden $n=1, l=0$, men med $Z=2$.

b) I He atomets grunntilstand er begge elektronene i rom-tilstanden Φ_{10} . Romdelen av $\Psi_1(1,2)$ er derved symmetrisk, og spin delen må være antisymm.:

$$\Psi_1(1,2) = \Phi_{10}(\vec{r}_1) \Phi_{10}(\vec{r}_2) \cdot \frac{1}{\sqrt{2}} (\chi_{\uparrow}(1) \chi_{\downarrow}(2) - \chi_{\downarrow}(1) \chi_{\uparrow}(2))$$

Spin singlett

Nest laveste energier får en med ett elektron i Φ_{10} og ett i Φ_{20} . Romdelen kan da velges symmetrisk eller antisymmetrisk. Lavest energi får den antisymmetriske muligheten, siden den gir større middelarvstand mellom elektronene, og derved lavere (frstøtnings-) Coulomb energi. Altså

$$\Psi_2(1,2) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\Phi_{10}(\vec{r}_1) \Phi_{20}(\vec{r}_2) - \Phi_{20}(\vec{r}_1) \Phi_{10}(\vec{r}_2))$$

$$\cdot \begin{cases} \chi_{\uparrow}(1) \chi_{\uparrow}(2) \\ \frac{1}{\sqrt{2}} (\chi_{\uparrow}(1) \chi_{\downarrow}(2) + \chi_{\downarrow}(1) \chi_{\uparrow}(2)) \\ \chi_{\downarrow}(1) \chi_{\downarrow}(2) \end{cases}$$

Spin triplett

En av de 3 mulige symmetriske spinntilstandene i spintripletten er realisert. Strøkt tzt er derfor dette 3 forskjellige tilstander, og det tilsvarende energinivå har degenerasjonsgrad 3.

Litt høyere energi enn Ψ_2 -tilstanden(e) har

$$\Psi_3(1,2) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\Phi_{10}(\vec{r}_1) \Phi_{20}(\vec{r}_2) + \Phi_{20}(\vec{r}_1) \Phi_{10}(\vec{r}_2)) \cdot$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}} (\chi_{\uparrow}(1) \chi_{\downarrow}(2) - \chi_{\downarrow}(1) \chi_{\uparrow}(2))$$

Ψ_1 & Ψ_3 : Para-He ; Ψ_2 : Orto-He.

Spin singlett

OPP gave 4.

a) 4.64 eV

b) $18 \text{ \AA}$

c) $\frac{\partial V}{\partial R} = 0 \Rightarrow A e^{-R_0/\rho} = \frac{\rho}{R_0} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 R_0} \right)$

$$V_0 = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 R_0} \left(1 - \frac{\rho}{R_0} \right)$$

$$\Rightarrow \frac{\rho}{R_0} = 1 - \frac{V_0}{e^2/4\pi\epsilon_0 R_0}$$

$$A = \frac{\frac{\rho}{R_0} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 R_0} \right)}{e^{-R_0/\rho}}$$