

Oppgave 1

a) Se lærebok

b) Energien til en dipol i et ytre magnetfelt kan skrives som

$$V_M = - \vec{\mu} \cdot \vec{B}$$

Krafta i z-retningen er da gitt som

$$F_z = - \frac{\partial}{\partial z} (-\mu_z \cdot B_z) = \mu_z \frac{\partial B_z}{\partial z}$$

Nå er $\langle \mu_z \rangle = -g_s \mu_B m_s$, slik at krafta kan skrives som

$$F_z = - \frac{\partial B_z}{\partial z} \mu_B g_s m_s$$

Hastigheten til et hydrogenatom som kommer ut fra ovnen er gitt av

$$\frac{1}{2} m v_x^2 = 2 k T$$

$$\Rightarrow v_x = \sqrt{\frac{4 k T}{m}}$$

Traverstiden er da gitt av

$$t = \frac{L_x}{v_x} = L_x \sqrt{\frac{m}{4kT}}$$

Legg merke til at vi skrev $2kT$, ikke $3/2kT$.
 Dette kommer fra at hastigheten ut fra
 en liten åpning (såkalt effusjon) i
 middel er større enn rms hastigheten.

Utslaget i z-retningen for et spinn opp
 atom blir da

$$z = \frac{1}{2} a_z t^2 = \frac{1}{2} \frac{F_z}{m} L_x^2 \frac{m}{4kT}$$

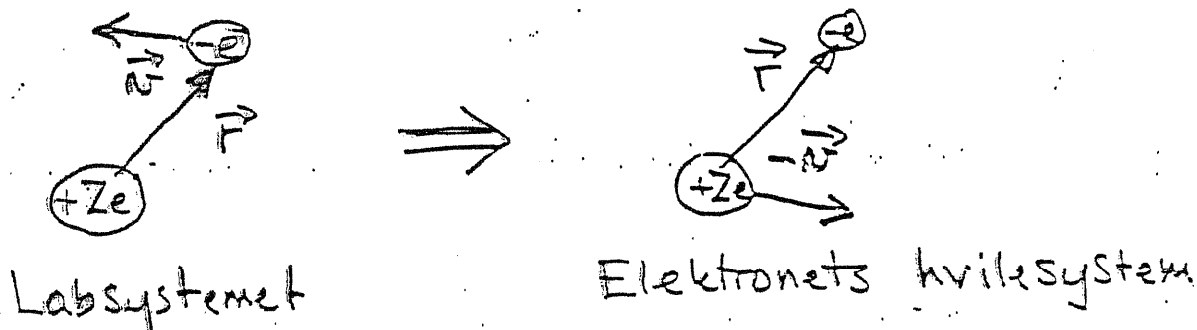
$$= - \frac{\frac{\partial B_z}{\partial z} \mu_B g_s m_s L_x^2}{8kT}$$

$$= \frac{15 \cdot 0.92 \cdot 10^{-23} \cdot 2 \cdot \frac{1}{2} \cdot 0.8^2}{8 \cdot 1.38 \cdot 10^{-23} \cdot 500} = 1.6 \cdot 10^{-3} \text{ m}$$

og tilsvarende for spin ned. Dette
 gir en splitting på: 3.2 mm.

Spinn-bane-kopling

Når relativistiske effekter (små!) tas med i betraktning, koples $\vec{L} \propto \vec{S}$. Vi innser dette ved å se på verden fra elektronets hvilesystem:



Følelsen fra Ze med hast. $-\vec{v}$, ved elektronet er:

$$\vec{B} = \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{(-\vec{v} Ze) \times \vec{r}}{r^3} = \frac{Ze}{4\pi\epsilon_0} \frac{\vec{r}}{r^3} \times \frac{\vec{v}}{c^2} = \frac{\vec{E} \times \vec{v}}{c^2}$$

pga dreieimpuls $\mu_0 \epsilon_0 = c^{-2}$ Coul. Mer generelt enn pkt.-ledning!

Før å generalisere:

La $\vec{E} = -\nabla\phi$, og $\phi(\vec{r}) = \phi(r)$, slik at

$$\vec{E} = -\frac{\vec{r}}{r} \frac{d\phi}{dr}$$

For det generelle tilfellet, forutsatt kulesymmetri

Da:

$$\vec{B}_L = -\frac{1}{r} \frac{d\phi}{dr} \frac{\vec{r} \times \vec{v}}{c^2} = -\frac{1}{m_e c^2} \frac{1}{r} \frac{d\phi}{dr} \vec{L} \quad (\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p})$$

Derved

$$V_{SL} = -\vec{\mu}_s \cdot \vec{B}_L = -\frac{g_s \mu_B}{m_e c^2 \hbar} \frac{1}{r} \frac{d\phi}{dr} \vec{S} \cdot \vec{L} \quad \text{I elektronets hvilesystem!}$$

Men vi må tilbake fra det akselererte hvilesystemet til elektronet, til labsystemet. Etter anstrangende (gen.) relativistiske transformasjoner (L.H. Thomas) er sluttresultatet det samme som ovenfor, dividerer med en faktor 2 !

$$\text{Altså: } V_{SL} = -\frac{e^2}{2m_e c^2} \frac{1}{r} \frac{d\phi}{dr} \vec{S} \cdot \vec{L} = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{\vec{S} \cdot \vec{L}}{2m_e c^2 r^3}$$

Siden $L=0$ er det ingen spin-bane splitting av grunntilstanden til H.

e)

Energien til et magnetisk moment i et magnetfelt B er gitt av

$$\Delta E = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}$$

Detta betyr at det tilsvarende magnetfeltet er gitt som

$$B = \frac{\Delta E}{|\mu|} \approx \frac{\Delta E}{\mu_B} = \frac{10^{-23}}{0.92 \cdot 10^{-23}} \approx 1.1 \text{ T}.$$

Oppgave 2.

- a) Når $-L \leq x \leq L$ er bølgefunksjonen en løsning av: $-\frac{\hbar^2}{2m} \psi'' = E \psi$

Dette fører til løsninger av formen $\psi \sim \cos kx$ eller $\psi \sim \sin kx$ med $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$

For $x \geq L$ er ψ en løsning av

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

$$\text{d.} \quad \psi'' = \alpha^2 \psi \quad \text{med løsning } \psi \sim e^{\pm \alpha x}$$

Bare minustegnet er akseptabelt for $x \geq L$, og plustegnet for $x \leq -L$.

Like paritet gir da en bølgefunksjon

$$\psi(x) = \begin{cases} A e^{\alpha x} & x \leq -L \\ B \cos kx & -L \leq x \leq L \\ A e^{-\alpha x} & x \geq L \end{cases}$$

$\psi(x) = \psi(-x)$ er oppfylt, d. Like paritet

- b) Tilsvarende for odde paritet

$$\psi(x) = \begin{cases} -A e^{\alpha x} & x \leq -L \\ B \sin kx & -L \leq x \leq L \\ A e^{-\alpha x} & x \geq L \end{cases}$$

c) Grensebetingelsene er at ψ og ψ' er kontinuerlige for $x = \pm L$

Like paritet:

$$\psi \text{ kont: } A e^{-\alpha L} = B \cos kL$$

$$\psi' \text{ --''-- } -\alpha A e^{-\alpha L} = -k B \sin kL$$

Divider disse to ligningene med hverandre. Det gir

$$\underline{\underline{\operatorname{tg} kL = \frac{\alpha}{k}}}$$

Odde paritet:

$$\psi \text{ kont: } A e^{-\alpha L} = B \sin kL$$

$$\psi' \text{ --''-- } -\alpha A e^{-\alpha L} = k B \cos kL$$

Divider $\Rightarrow$

$$\underline{\underline{\cot kL = -\frac{\alpha}{k}}}$$

d) Normering: $\int_{-\infty}^{\infty} |\psi|^2 dx = 1$

$$\Rightarrow B^2 \int_0^L \cos^2 kx dx + A^2 \int_L^{\infty} e^{-2\alpha x} dx = \frac{1}{2}$$

$$B^2 \int_0^L \left(\frac{1}{2k} \sin kx \cos kx + \frac{1}{2} x \right) + \frac{A^2}{-2\alpha} \int_L^\infty e^{-2\alpha x} = \frac{1}{2}$$

$$B^2 \left(\frac{1}{2k} \sin kL \cos kL + \frac{1}{2} L \right) + \frac{A^2}{2\alpha} e^{-2\alpha L} = \frac{1}{2}$$

Vi benytter oss av grensebetingelsene

$$A e^{-\alpha L} = B \cos kL$$

$$-\alpha A e^{-\alpha L} = -B k \sin kL$$

$$B^2 \left(\frac{1}{2k} \sin kL \cos kL + \frac{1}{2} L \right) + B \cos kL \cdot B \frac{k}{2\alpha^2} \sin kL = \frac{1}{2}$$

$$B^2 \left(\left(\frac{1}{2k} + \frac{k}{2\alpha^2} \right) \sin kL \cos kL + \frac{1}{2} L \right) = \frac{1}{2}$$

Dette gir B, men uttrykket kan forenkles videre

$$\tan kL = \frac{\alpha}{k}$$

$$\Rightarrow \sin kL = \frac{\tan kL}{\sqrt{1 + \tan^2 kL}}, \quad \cos kL = \frac{1}{\sqrt{1 + \tan^2 kL}}$$

$$\Rightarrow B^2 \left[\frac{1}{2} \left(\frac{1}{k} + \frac{k}{\alpha^2} \right) \cdot \frac{\alpha/k}{\sqrt{1 + \alpha^2/k^2}} \cdot \frac{1}{\sqrt{1 + \alpha^2/k^2}} + \frac{1}{2} L \right] = \frac{1}{2}$$

$$\Rightarrow B^2 \left(\frac{1}{\alpha} + L \right) = 1$$

$$B^2 = \frac{1}{L + \frac{1}{\alpha}}$$

$$A = \frac{B \cdot e^{\alpha L}}{\sqrt{1 + \alpha^2/k^2}}$$

e) Endringen i energi p.g. av pertubasjonen er til laveste orden gitt av

$$\Delta E = \int |\psi(x)|^2 \Delta V dx$$

∴ ΔE er liten dersom ψ er liten i området der $\Delta V \neq 0$. Dette betyr:

Symmetriske bølgefunksjoner:

ΔE er størst dersom pertubasjonen er i sentrum av brønnen.

Antisymmetriske bølgefunksjoner

ΔE er liten både når pertubasjonen er i sentrum og nær kanten. Den er størst når pertubasjonen er $\approx$ i nærheten av $\pm L/2$.

Oppgave 3.

a) Kinetisk energi $E_k = \frac{p^2}{2M} + \frac{p^2}{2m}$

Potensiell $E_v = \frac{1}{2}k(x - \bar{x})^2$

$$\Rightarrow H = \frac{p^2}{2M} + \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}k(x - \bar{x})^2$$

$$\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$$

b) Vi innfører nye koordinater

$$Q = \frac{mx + MX}{m+M}$$

Tyngdepunktskoord.

$$q = x - \bar{x}$$

Relative koord.

$$\Rightarrow \bar{x} = Q - \frac{m}{m+M} q$$

$$x = Q + \frac{M}{m+M} q$$

Disse settes inn i uttrykkene for E_k og E_{pot}

$$E_k = \frac{1}{2}M\dot{\bar{x}}^2 + \frac{1}{2}m\dot{x}^2 = \frac{1}{2}M\left(\dot{Q} - \frac{m}{m+M}\dot{q}\right)^2 + \frac{1}{2}m\left(\dot{Q} + \frac{M}{m+M}\dot{q}\right)^2$$

$$= \frac{1}{2}(m+M)\dot{Q}^2 + \frac{1}{2}\frac{mM}{m+M}\dot{q}^2$$

$$= \frac{P_Q^2}{2(m+M)} + \frac{P_q^2}{2\mu}$$

$$\mu = \frac{m+M}{m+M}$$

$$E_{\text{pot}} = \frac{1}{2} k q^2$$

Hamiltonfunktion:

$$\mathcal{H} = \frac{p_Q^2}{2(m+M)} + \frac{p_q^2}{2\mu} + \frac{1}{2} k q^2$$

c) Vi forsøker med å skrive

$$\Psi = \chi(Q) \phi(q)$$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2(m+M)} \nabla_Q^2 - \frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_q^2 + \frac{1}{2} k q^2 \right) \chi(Q) \phi(q) = E \chi \phi$$

$$\Rightarrow \underbrace{-\frac{1}{\chi(Q)} \frac{\hbar^2}{2(m+M)} \frac{d^2 \chi(Q)}{dQ^2}}_{K_1} - \underbrace{\frac{1}{\phi(q)} \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2 \phi(q)}{dq^2} + \frac{1}{2} k q^2}_{K_2} = E$$

$$\Rightarrow \frac{\hbar^2}{2(m+M)} \frac{d^2 \chi}{dQ^2} = -K_1 \chi$$

Med løsning: $\chi(Q) = e^{\pm i k_1 Q}$

og energi $E_Q = \frac{\hbar^2}{2(m+M)} K_1^2$

Den andre delen gir

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2 \phi(q)}{dq^2} + \frac{1}{2} k q^2 = E - E_Q$$

∴ ϕ er bølgefunksjon for en harmonisk oscillator

Total E er da gitt av

$$E = \frac{\hbar^2 k_1^2}{2(M+m)} + (n + \frac{1}{2}) \hbar \omega_\mu$$

med $\omega_\mu = \sqrt{\frac{k}{\mu}}$.

Når $M \rightarrow \infty$ går $\mu \rightarrow m$, vi får den vanlige harmoniske oscillator.

d) Schrödingeligningen

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} k x^2 - e \mathcal{E} x \right) \psi(x) = E \psi(x)$$

Detta kan omformes

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} k \left(x^2 - \frac{2e\mathcal{E}}{k} x + \frac{e^2 \mathcal{E}^2}{k^2} - \frac{e^2 \mathcal{E}^2}{k^2} \right) \right) \psi = E \psi$$

$$\Rightarrow \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} k \left(x - \frac{e\mathcal{E}}{k} \right)^2 \right) \psi(x) = \left(E + \frac{e^2 \mathcal{E}^2}{2k} \right) \psi$$

Detta er en harmonisk oscillator sentrert omkring $x = \frac{e\mathcal{E}}{k}$.

Energien er da gitt av

$$E = (n + \frac{1}{2}) \hbar \omega_c - \frac{e^2 \mathcal{E}^2}{2k}$$

$$\omega_c = \sqrt{\frac{k}{m}}$$

Oppgave 4.

a) Se oppgave 3.

Energiforskjellen mellom grunnfilstanden og lavest eksiterte tilstand er gitt av $\Delta E = \hbar \omega_c$ med $\omega_c = \sqrt{\frac{k}{\mu}}$

$$\mu = \frac{mM}{m+M} = \frac{1 \cdot 35.5}{1 + 36.5} \cdot M_H = \frac{35.5}{36.5} \cdot 1.67 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$$

Detta gir

$$\Delta E = \hbar \omega_c = 1.055 \cdot 10^{-34} \sqrt{\frac{470}{1.62 \cdot 10^{-27}}} \cdot \frac{1}{1.6 \cdot 10^{-19}} = 0.35 \text{ eV}$$

b) Rotasjonsenergien er gitt av

$$E_r = \frac{\hbar^2}{2I} n(n+1) \quad r = 0, 1, 2, \dots$$

Energiforskjellen mellom de to laveste nivåene:

$$\begin{aligned} \Delta E &= \frac{\hbar^2}{2I} (1 \cdot 2 - 0 \cdot 1) = \frac{\hbar^2}{I} \\ &= \frac{1.055 \cdot 10^{-34}}{2.66 \cdot 10^{-47} \cdot 1.6 \cdot 10^{-19}} = 2.6 \cdot 10^{-3} \text{ eV} \end{aligned}$$

Detta er 142x lavere enn forskjellen mellom to vibrasjonsnivåer. Derimot; dersom vi setter

$$\frac{\hbar^2}{2I} r(r+1) = 0.35 \text{ eV} \quad \text{finner } n$$

$$r =$$

$$r(r+1) = \frac{0.35}{\frac{\hbar^2}{2I}} = \frac{0.70}{0.0026} = 269$$

$$\Rightarrow r = 17.$$

$\therefore$ Det er 17 rotasjonsnivåer mellom to vibrasjonsnivåer i dette tilfellet.

c) Vi antar Boltzmann statistikk

$$\text{Det gir } e^{-\frac{\Delta E}{kT}} = e^{-1} \quad \Delta E = 0.35 \text{ eV}$$

$$\Rightarrow \underline{\underline{T = 3675 \text{ K}}}$$