Oppgave 4.5, Eksamen V-1997

Vi skal i denne oppgaven studere det kvantemekaniske problem med en partikkel med masse m som beveger seg i et potensial av formen

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & & x < -a \\ 0 & \text{for} & -a \leq x < +a \\ V_0 & & x \geq +a \end{cases}$$

a) For $0 < E < V_0$ løs den tidsuavhengige egenverdiligningen for hvert av de tre områdene hvor den potensielle energien er konstant.

b) Gi en kort oversikt over de krav som stilles til den kvantemekaniske bølgefunksjonen. Bruk dette til å finne de betingelsesligningene som egenfunksjonene i punkt a) må tilfredsstille.

c) Vi antar nå at grunntilstands energien $E_0 = V_0/2$. Bruk dette til å løse ligningene i b) og vis at

$$a = \frac{1}{4}\sqrt{\frac{\hbar^2\pi^2}{mV_0}}$$

d) Bestem alle de andre konstantene for grunntilstands bølgefunksjonen. Lag en skisse av funksjonen og vis at den tilfredsstiller $\Psi(-x) = +\Psi(x)$.

e) Den første eksiterte tilstand må tilfredsstille $\Psi(-x) = -\Psi(x)$. Bruk dette og uttrykkene i a) til å bestemme formen på den første eksiterte tilstanden. Skissér funksjonen.

f) Uten å løse problemet eksakt, prøv å finne argumenter som viser at en slik eksitert tilstand er mulig.

Løsning

a) Området I: $-\infty < x < -a$.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi_I(x) + V_0\psi_I(x) = E\psi_I(x),$$

med løsning

$$\psi_I(x) = Ae^{+\alpha x} \quad \text{hvor} \quad \alpha = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E)}$$

Komponenten $e^{-\alpha x}$ vokser over alle grenser for $x \longrightarrow -\infty$ og må fjernes.

Området II: $-a < x < +a$.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi_{II}(x) = E\psi_{II}(x),$$

med løsning

$$\psi_{II}(x) = Be^{+ikx} + Ce^{-ikx} \quad \text{hvor} \quad k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}E} \tag{1}$$

Området III: $+a < x < +\infty$.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi_{III}(x) + V_0\psi_{III}(x) = E\psi_{III}(x),$$

med løsning

$$\psi_{III}(x) = De^{-\alpha x} \quad \text{hvor} \quad \alpha = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E)}$$

Komponenten $e^{+\alpha x}$ vokser over alle grenser for $x \longrightarrow +\infty$ og må fjernes.

b) Løsningen $\psi(x)$ av Schrödinger ligningen må tilfredsstille følgende krav

1. $\psi(x)$ må være éntydig, kontinuerlig og begrenset overalt.
2. For bundne systemer må funksjonen være normérbar.
3. Overalt hvor den potensielle energien $V(x)$ er endelig, må den deriverte av $\psi(x)$ være kontinuerlig.

I punktet $x = -a$ får vi betingelsene

$$\begin{aligned} Ae^{-\alpha a} &= Be^{-ika} + Ce^{+ika} && (2)\\ \alpha Ae^{-\alpha a} &= ik\left(Be^{-ika} - Ce^{+ika}\right) && (3) \end{aligned}$$

og i punktet $x = +a$ betingelsene

$$\begin{aligned} De^{-\alpha a} &= Be^{+ika} + Ce^{-ika} && (4)\\ -\alpha De^{-\alpha a} &= ik\left(Be^{+ika} - Ce^{-ika}\right) && (5) \end{aligned}$$

c) For $E_0 = V_0/2$ får vi

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} = \sqrt{\frac{mV_0}{\hbar^2}}; \quad \alpha = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E)} = \sqrt{\frac{mV_0}{\hbar^2}} = k$$

Det gir

$$B + Ce^{2ika} = i\left(B - Ce^{+2ika}\right)$$

Realdelen og imaginærdelen gir to separate ligninger

$$\begin{aligned} B + C\cos(2ka) &= C\sin(2ka)\\ B - C\cos(2ka) &= C\sin(2ka) \end{aligned}$$

med løsning $2C\cos(2ka) = 0$ og $ka = \pi/4$ for grunntilstanden. Dette gir

$$a = \frac{\pi}{4k} = \frac{1}{4}\sqrt{\frac{\hbar^2\pi^2}{mV_0}}$$

Ligningsettet ovenfor gir muligheter for andre løsninger, men de vil ha $ka > \pi/4$ og kan ikke svare til grunntilstanden av systemet som forutsatt.

Fra ligningene (4) og (5) for $x = +a$ får vi

$$B + Ce^{-2ika} = -i\left(B - Ce^{-2ika}\right)$$

Realdelen og imaginærdelen gir to separate ligninger

$$\begin{aligned} B + C\cos(2ka) &= C\sin(2ka) \\ -B + C\cos(2ka) &= -C\sin(2ka) \end{aligned}$$

med samme løsning for a.

d) Fra løsningen i c) følger at $C = B$ og fra lign (2) kan vi bestemme B og C som funksjon av A

$$B = C = \sqrt{\frac{1}{2}} e^{-\alpha a} A$$

Fra lign (4) får vi $D = A$. Grunntilstands bølgefunksjonen blir da

$$\begin{aligned} x < -a: &\quad \psi(x) = Ae^{\alpha x} \\ -a < x < +a: &\quad \psi(x) = Ae^{-\alpha a}\sqrt{2}\cos(ka) \\ +a < x: &\quad \psi(x) = Ae^{-\alpha x} \end{aligned} \tag{6}$$

og denne funksjonen har paritet$= +1$. Konstanten A bestemmes ved normalisering

$$\begin{aligned} 1 &= 2\int_0^{+\infty} \psi^*(x)\psi(x)dx = \int_0^a \psi_{II}^*(x)\psi_{II}(x)dx + \int_a^{+\infty} \psi_{III}^*(x)\psi_{II}(x)dx \\ &= 4|A|^2 e^{-2\alpha a}\int_0^a \cos^2(kx)dx + 2|A|^2\int_a^{+\infty} e^{-2\alpha x}dx \\ &= 4|A|^2 e^{-2\alpha a}\frac{1}{k}\left(\frac{1}{2}\sin(ka)\cos(ka) + \frac{1}{2}ka\right) + |A|^2\frac{1}{\alpha}e^{-2\alpha} \\ &= |A|^2\left(\frac{1}{2} + \frac{3}{\pi}\right)e^{-\pi/2}a \end{aligned}$$

som gir

$$|A|^2 = A^2 = \frac{1}{a}\left(\frac{1}{2} + \frac{3}{\pi}\right)e^{\pi/2}$$

e) Første eksiterte tilstand har paritet$= -1$. Det gir $\psi_1(x = 0) = 0$. Ser vi på den generelle løsningen $\psi_{II}(x)$ ovenfor må det bety at $B = -C$ og formen $\psi_1(x) = 2Bi\sin(k_1 x)$. For $x < -a$ og $x > +a$ blir formen $\pm konstant\ e^{\pm\alpha_1 x}$.

f) Den første bundne eksiterte tilstand må ha $E_1 < V_0$. Dette gir

$$k_1 = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}E_1} < \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}V_0}$$

og

$$(k_1 a)_{maks} < a\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}V_0} = a\sqrt{2}k = \frac{\pi}{4}\sqrt{2}$$

Ser vi nærmere på bølgefunksjonen skissert i fig.1 for $\psi_1(x)$ i punktet $x = a$ svarer det til en verdi på argumentet $ka > \pi/2$. Dette betyr at betingelsene ovenfor ikke oppfylles, og følgelig har vi kun én bunden egentilstand.

Alternativ løsning:

a) Vi kan alternativt skrive løsningen i området $-a < x < +a$ på formen

$$\psi_{II}(x) = B\cos(kx) + C\sin(kx) \tag{7}$$

b) Betingelsesligningene blir da:
I punktet $x = -a$

$$\begin{aligned} Ae^{-\alpha a} &= B\cos(ka) - C\sin(ka) && (8) \\ \alpha Ae^{-\alpha a} &= k\left(B\sin(ka) + C\cos(ka)\right) && (9) \end{aligned}$$

og i punktet $x = +a$

$$\begin{aligned} De^{-\alpha a} &= B\cos(ka) + C\sin(ka) && (10) \\ -\alpha De^{-\alpha a} &= k\left(-B\sin(ka) + C\cos(ka)\right) && (11) \end{aligned}$$

c) Dette gir i punktet $x = -a$

$$B\cos(ka) - C\sin(ka) = B\sin(ka) + C\cos(ka)$$

eller

$$(B - C)\cos(ka) - (B + C)\sin(ka) = 0$$

med fire mulige løsninger

$$\begin{aligned} B = 0: &\qquad \cos(ka) + \sin(ka) = 0; \;\longrightarrow\; ka = \frac{3\pi}{4} \\ C = 0: &\qquad \cos(ka) - \sin(ka) = 0; \;\longrightarrow\; ka = \frac{\pi}{4} \\ B = C: &\qquad \sin(ka) = 0; \;\longrightarrow\; ka = \pi \\ B = C: &\qquad \cos(ka) = 0; \;\longrightarrow\; ka = \frac{\pi}{2} \end{aligned}$$

I punktet $x = +a$ får vi betingelsen

$$B\cos(ka) + C\sin(ka) = B\sin(ka) - C\cos(ka)$$

eller

$$(B + C)\cos(ka) - (B - C)\sin(ka) = 0$$

igjen med fire mulige løsninger

$$\begin{aligned} B = 0: &\qquad \cos(ka) + \sin(ka) = 0; \;\longrightarrow\; ka = \frac{3\pi}{4} \\ C = 0: &\qquad \cos(ka) - \sin(ka) = 0; \;\longrightarrow\; ka = \frac{\pi}{4} \\ B = C: &\qquad \cos(ka) = 0; \;\longrightarrow\; ka = \frac{\pi}{2} \\ B = -C: &\qquad \sin(ka) = 0; \;\longrightarrow\; ka = \pi \end{aligned}$$

To løsninger er mulige når vi skal tilfredsstille betingelsene i begge punktene $x = \pm a$, $B = 0$ og $ka = 3\pi/4$ eller $C = 0$ og $ka = \pi/4$.

Løsningen $B = 0$ svarer til første eksiterte tilstand. Det skulle gå frem av fig.1. Mens løsningen $C = 0$ er grunntilstanden – den vi ønsker. Og vi får samme svar som tidligere.

Oppgave 5.7, Eksamen V-1993

Vi skal i denne oppgaven studere det kvantemekaniske problem med en partikkel som beveger seg langs x–aksen med en potensiell energi $V(x)$. Partikkelen har masse m.

a) Sett opp den tidsavhengige Schrödingerligningen for systemet som bestemmer bølgefunk- sjonen $\Psi(x,t)$.

b) Vis at $\Psi(x,t)$ kan skrives på formen $\Psi(x,t) = \psi(x)\phi(t)$. Finn $\phi(t)$ og ligningen som bestemmer $\psi(x)$.

Vi velger nå den potensielle energi som

$$V(x) = \begin{cases} +\infty & & x < 0 \\ 0 & \text{for} & 0 \leq x < a \\ +\infty & & x \geq a \end{cases}$$

c) Finn energi egenverdiene og de normerte energi egenfunksjonene $\psi(x)$.

d) Bestem middelverdien (forventningsverdien) for $\widehat{\mathbf{x}}$ og $\widehat{\mathbf{x}}^2$ samt middelverdien for bevegelsesmeng- den $\widehat{\mathbf{p}}$ og $\widehat{\mathbf{p}}^2$.

e) Formulér Heisenbergs uskarphetsrelasjon og regn den ut for grunntilstanden i systemet. Vis at dette eksemplet er i overensstemmelse med det generelle prinsipp.

Ved tiden $t = 0$ er systemet i en tilstand beskrevet ved bølgefunksjonen

$$\Psi(x,0) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\psi_1(x) - \psi_2(x)\right).$$

hvor $\psi_1(x)$ og $\psi_2(x)$ er de to laveste normerte egentilstandene for systemet.

f) Bestem systemets tilstand $\Psi(x,t)$ og beregn forventningsverdiene av $\widehat{\mathbf{x}}$ i denne tilstanden.

Løsning

c) Ligningen for $\psi(x)$ kan skriver på formen

$$\left(\frac{d^2}{dx^2} + k^2\right)\psi(x) = 0,$$

for $0 \leq x \leq a$ og med $k = \sqrt{2mE/\hbar^2}$. Løsningen har formen

$$\psi(x) = A\exp(ikx) + B\exp(-ikx).$$

Randbetingelsen for $x = 0$ gir $A + B = 0$, eller $A = -B$, og

$$\psi(x) = A\left(\exp(ikx) - \exp(-ikx)\right) = A' \sin(kx).$$

Randbetingelsen for $x = a$ gir $\psi(a) = 0 \quad \longrightarrow \quad \sin(ka) = 0$ med resultat $k_n a = n\pi$, $n = 1, 2, 3, \ldots$. Kvantebetingelsen for energi egenverdiene blir

$$E_n = \frac{\hbar^2\pi^2}{2a^2 m} n^2 \qquad n = 1, 2, 3, \ldots.$$

Normering av energi egenfunksjonene

$$\left(A'\right)^2 \int_0^a \sin^2(k_n x)dx = \frac{a}{2}\left(A'\right)^2.$$

Dette gir $A' = \sqrt{2/a}$, og de normerte egenfunksjonene blir

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin(k_n x).$$

d) Middelverdien av x:

$$< x >= \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x)^* x \psi(x) dx = \frac{a}{2}$$

Middelverdien av x^2:

$$< x^2 >= \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x)^* x^2 \psi(x) dx = a^2\left(\frac{1}{3} - \frac{1}{2\pi^2 n^2}\right)$$

Middelverdien av p er

$$< p >= \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x)^* \left(-i\hbar\frac{d}{dx}\right)\psi(x)dx = 0$$

og middelverdien av p^2

$$< p^2 >= \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x)^* \left(-i\hbar\frac{d}{dx}\right)^2 \psi(x)dx == \hbar^2 k_n^2$$

e) Heisenbergs uskarphetsrelasjon er $\Delta x \Delta p \geq (1/2)\hbar$, hvor $\Delta x = \sqrt{< x^2 > -(< x >)^2}$ og $\Delta p = \sqrt{< p^2 > -(< p >)^2}$. Fra d) får vi for grunntilstanden $(n = 1)$

$$\Delta x = a\sqrt{\frac{1}{12} - \frac{1}{2\pi^2}}, \quad \Delta p = \frac{\hbar\pi}{a}, \quad og \quad \Delta x \Delta p = \hbar\sqrt{\frac{\pi^2}{12} - \frac{1}{2}} \approx 0.57\hbar > \frac{\hbar}{2}$$

f) Systemets tilstand ved tiden t er

$$\begin{aligned}\Psi(x,t) &= \sqrt{\frac{1}{a}}\left(\sin(k_1 x)\exp(-\frac{i}{\hbar}E_1 t) - \sin(k_2 x)\exp(-\frac{i}{\hbar}E_2 t)\right) \\ &= \sqrt{\frac{1}{a}}\left(\sin(\frac{\pi}{a}x)\exp(-\frac{i}{\hbar}E_1 t) - \sin(\frac{2\pi}{a}x)\exp(-\frac{i}{\hbar}4E_1 t)\right).\end{aligned}$$

Middelverdien ax x er gitt ved

$$< x >= \frac{a}{2} + \frac{16a}{9\pi^2}\cos(\frac{3E_1}{\hbar}t).$$

Oppgave 5.8, Eksamen V-1996

Vi skal i denne oppgaven studere det kvantemekaniske problem med en partikkel i et harmonisk oscillator potensial. Partikkelen har masse m og den kvantemekaniske hamilton operatoren kan skrives på formen

$$\widehat{\mathbf{H}} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2.$$

To av egentilstandene er gitt ved

$$\psi_k(x) = N\exp(-\alpha x^2), \quad \psi_l(x) = 2\sqrt{\alpha}x\psi_k(x)$$

a) Vis at $\psi_k(x)$ og $\psi_l(x)$ er egenfunksjoner av $\widehat{\mathbf{H}}$ og bestem α uttrykt ved oscillator parameteren ω. Finn de tilhørende energi egenverdier og vis at de følger formelen $E_n = (n + 1/2)\hbar\omega$. Bestem hvilke n–verdier som svarer til $\psi_k(x)$ og $\psi_l(x)$. Beregn normeringskonstanten N.

For egentilstander til den harmoniske oscillator gjelder generelt

$$\phi_n(-x) = (-1)^n\phi_n(x).$$

b) Bruk relasjonen til å vise at middelverdien av posisjonen $\langle\widehat{\mathbf{x}}\rangle$ og bevegelsesmengden $\langle\widehat{\mathbf{p}}_x\rangle$ begge er null.

I det følgende skal vi studere hvordan systemet utvikler seg som funksjon av tiden t.

c) Systemets tilstand ved $t = 0$ er gitt ved bølgefunksjonen $\psi_k(x, t = 0) = \psi_k(x)$. Forklar hvordan vi går frem for å bestemme funksjonen $\psi_k(x, t)$ for systemet og finn denne funksjonen.

Vi antar nå at systemet er i tilstanden $\psi_k(x, t)$ for $t \leq 0$. Ved tiden $t = 0$ får vi en momentan forandring av systemets potensielle energi $\frac{1}{2}m\omega^2x^2 \longrightarrow \frac{1}{2}m(2\omega)^2x^2$ slik at for $t > 0$ vil systemet være beskrevet ved en hamilton operator av formen

$$\widehat{\mathbf{H}}_{ny} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m(2\omega)^2x^2.$$

d) Finn de to laveste energi egentilstandene for $\widehat{\mathbf{H}}_{ny}$.

La oss angi alle energi egenfunksjonene for den nye hamilton operatoren $\widehat{\mathbf{H}}_{ny}$ som $\phi_n(x)$.

e) I pkt. d) fant vi funksjonen $\psi_k(x, t)$ for $t \leq 0$. Sett opp $\psi_k(x, t)$ for $t > 0$ uttrykt ved energi egenfunksjonene $\phi_n(x)$ for $\widehat{\mathbf{H}}_{ny}$.

f) Beregn sannsynligheten for at systemet ved tiden $t = 0^+$ (et infinitesimalt tidspunkt etter $t = 0$) er i grunntilstanden for $\widehat{\mathbf{H}}_{ny}$. Hva er sannsynligheten for at systemet er i den første eksiterte tilstand for $\widehat{\mathbf{H}}_{ny}$?

g) Beregn $\langle\widehat{\mathbf{x}}^2\rangle$, $\langle\widehat{\mathbf{x}}\rangle$ og den midlere energi $\langle\widehat{\mathbf{E}}\rangle$ ved tiden $t = 0^+$.

h) Hvilke av de tre størrelsene beregnet i pkt. g) er uavhengig av tiden t for $t > 0$? Begrunn svaret.

Kort fasit

a) $\psi_k(x)$ svarer til $n = 0$ og $\psi_l(x)$ til $n = 1$. $\alpha = (m\omega)/2\hbar)$ og $N = ((m\omega)/(\hbar\pi))^{1/4}$.

c) Se læreboka *Brehm and Mullin: Introduction to the structure of matter*, eksempel side 233, $\psi_k(x,t) = \psi_k(x)\exp(-(i/\hbar)(\hbar\omega/2)\ t)$

d) Vi får de to laveste løsningene ved å ta ψ_k og ψ_l fra pkt. a) og bytte ut ω med 2ω.

e) Se læreboka *Brehm and Mullin: Introduction to the structure of matter*, eksempel side 233. Funksjonen $\psi_k(x)$ har paritet +1. For $t > 0$ får vi derfor

$$\psi_k(x,t) = \sum_{like\ n} c_n \phi_n(x) \exp(-(i/\hbar)E_n^{ny}\ t)$$

f) Sannsynlighetet for å finne systemet i grunntilstanden for $\widehat{\mathbf{H}}^{ny}$ ved $t = 0^+$ blir

$$P_0 = \left(\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_k(x,0^+)^* \phi_0(x,0^+) dx \right) = (8/9)^{1/2}$$

Sannsynlighetet for å finne systemet i 1. eksiterte tilstand er null.

g) $< x^2 >= 1/(4\alpha)$, $< x >= 0$ og

$$< E >= \sqrt{\frac{2\alpha}{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp(-\alpha x^2) \widehat{\mathbf{H}}^{ny} \exp(-\alpha x^2) dx = \frac{7}{4}\hbar\omega$$

h) Vi bruker svaret i pkt. e) og få at middelverdien av en fysisk størrelse (operator) blir

$$< \widehat{\mathbf{F}} >= \sum_{n,n'} c_n^* c_{n'} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi_n(x,t)^* \widehat{\mathbf{F}} \phi_{n'}(x,t) dx \exp(-\frac{i}{\hbar}(E_{n'} - E_n)\ t)$$

For $\widehat{\mathbf{F}} = \widehat{\mathbf{H}}^{ny}$ får vi

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \phi_n(x,t)^* \widehat{\mathbf{F}} \phi_{n'}(x,t) dx = E_n^{ny} \delta_{n,n'}$$

og

$$< \widehat{\mathbf{H}}^{ny} >= \sum_n |c_n|^2 E_n^{ny},$$

dvs. uavhengig av t. For $\widehat{\mathbf{F}} = x$ blir

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \phi_n(x,t)^* x \phi_{n'}(x,t) dx = 0$$

siden integranden har paritet -1 og $< x >$ blir tidsuavhengig. For $\widehat{\mathbf{F}} = x^2$ blir middelverdien avhengig av t.

Oppgave 6.1, Eksamen H-1992

a) Forklar kort hvilken fysisk betydning vi tillegger en bølgefunksjon $\Psi(\vec{r}, t)$ i kvantemekanikken. Hvilke matematiske krav må vi stille til en slik bølgefunksjon? Forklar hva vi mener med en operator og en egenfunksjon for en operator.

b) Skriv ned den tidsavhengige Schrödingerligningen for en partikkel med potensiell energi $V(\vec{r})$.

c) Vis at løsningene kan skrives på formen

$$\Psi(\vec{r}, t) = \psi(\vec{r}) \exp(-iEt/\hbar).$$

og finn den ligningen som $\psi(\vec{r})$ tilfredsstiller.

d) Anta at $A(\vec{r}, \vec{p})$ er en fysisk størrelse (funksjon av koordinat og bevegelsesmengde) tilordnet en partikkel. Hvordan kommer vi i kvantemekanikken fram til de verdier som er mulig å finne når vi gjør en ideell måling av den fysisk størrelsen A?

I det følgende skal vi studere en partikkel med masse m som beveger seg i en potensialbrønn gitt ved

$$V(x) = \begin{cases} 0 & & x < 0 \\ -V_0 & \text{for} & 0 \leq x < a \\ 0 & & x \geq a \end{cases}$$

hvor $V_0 > 0$ og med energi $E > 0$.

e) Anta at partikkelen kommer inn fra $x = -\infty$ og beveger seg mot potensialbrønnen. Beskriv uten utregning hva som skjer i punktene $x = 0$ og $x = a$. Skissér bølgefunksjonen for partikkelen i områdene $x < 0$, $0 \leq x \leq a$ og $x > a$, og finn et uttrykk for bølgelengden til partikkelen i disse områdene.

f) Skriv ned løsningen av Schrödingerligningen for problemet samt de randkravene denne må oppfylle.

g) Vis at ligningene for randkravene kan skrives på formen

$$\begin{aligned} 1 + \frac{B}{A} &= \frac{C}{A} + \frac{D}{A} \\ 1 - \frac{B}{A} &= \lambda\left(\frac{C}{A} - \frac{D}{A}\right) \\ \frac{C}{A}\exp(ik'a) + \frac{D}{A}\exp(-ik'a) &= \frac{F}{A}\exp(ika) \\ \lambda\left(\frac{C}{A}\exp(ik'a) - \frac{D}{A}\exp(-ik'a)\right) &= \frac{F}{A}\exp(ika) \end{aligned}$$

hvor $\lambda = \sqrt{1 + V_0/E}$. Forklar betydningen av konstantene A, B, C, D, F, k og k'.

h) Vi antar nå at $V_0 = 3E$. Vis at sannsynligheten, uttrykt ved E, for at partikler reflekteres tilbake til området $x < 0$ er gitt ved

$$\mathbf{R} = \frac{1}{25/9 + 16/9\left[cotg\left(\frac{a}{\hbar}\sqrt{8mE}\right)\right]^2}.$$

Kort fasit

a),b),c) Se læreboka *Brehm and Mullin: Introduction to the structure of matter*, avsnitt 5.1, 5.2

d) Den fysiske størrelsen overføres til en kvantemekanisk operator $A(\vec{r},\vec{p}) \Longrightarrow A(\widehat{\vec{\mathbf{r}}},\widehat{\vec{\mathbf{p}}})$, hvor $\widehat{\vec{\mathbf{r}}} = \vec{r}$ og $\widehat{\vec{\mathbf{p}}} = -i\hbar\vec{\bigtriangledown}$.

Vi løser egenverdiligningen

$$A(\widehat{\vec{\mathbf{r}}},\widehat{\vec{\mathbf{p}}})\Phi_\nu = A_\nu\Phi_\nu$$

og de eneste mulige verdiene vi kan få ved en ideell måling er en av egenverdiene A_ν.

e) En plan bølge med bølgetall $k = \sqrt{(2m/\hbar^2)E}$ kommer inn fra $x = -\infty$. I punktet $x = 0$ dannes det en reflektert bølge med bølgetall $-k$. En ny bølge fortsetter mot positiv x med bølgetall $k^{'} = \sqrt{(2m/\hbar^2)(E+V)}$. I punktet $x = a$ dannes det en reflektert bølge med bølgetall $-k^{'}$. En ny bølge fortsetter mot $x = \infty$ med bølgetall k. Dette er vist i figur 2:

f) Løsningen av Schrödingerligningen blir

$$\begin{aligned}
\psi_I(x) &= A\exp(ikx) + B\exp(-ikx) \quad x < a \\
\psi_{II}(x) &= C\exp(ik^{'}x) + D\exp(-ik^{'}x) \quad 0 < x < a \\
\psi_{III}(x) &= F\exp(ikx) \qquad\qquad x > a
\end{aligned}$$

Randkravene i $x = 0$ og $x = a$ gir

$$\begin{aligned}
\psi_I(x=0) = \psi_{II}(x=0) &\longrightarrow A + B = C + D \\
\psi_I^{'}(x=0) = \psi_{II}^{'}(x=0) &\longrightarrow k(A-B) = k^{'}(C-D) \\
\psi_{II}(x=a) = \psi_{III}(x=a) &\longrightarrow C\exp(ik^{'}a) + D\exp(-ik^{'}a) = F\exp(ika) \\
\psi_{II}^{'}(x=a) = \psi_{III}^{'}(x=a) &\longrightarrow k^{'}(C\exp(ik^{'}a) - D\exp(-k^{'}a) = kF\exp(ika)
\end{aligned}$$

Ved omforming får vi ligningene som er gitt i oppgaven hvor

$$\lambda = \frac{k^{'}}{k} = \sqrt{\frac{E+V_0}{E}} = \sqrt{1+\frac{V_0}{E}}$$

h) Refleksjonsfaktoren er definert ved

$$R = \left|\frac{B}{A}\right|^2$$

Løsning av ligningene under g) m.h.p. B/A gir svaret for refleksjonskoeffisienten R.

Oppgave 6.6, Eksamen V-1994

En jevn strøm av partikler, hver med masse m, beveger seg langs x–aksen i positiv retning. Den potensielle energien er gitt ved

$$V(x) = \begin{cases} V_1 & \qquad x < 0 \\ 0 & \text{for} \quad 0 \le x < a \\ V_3 & \qquad x \ge a \end{cases}$$

hvor partiklenes energi $E > V_1 > V_3 > 0$.

a) Løs den tidsuavhengige energi egenverdiligningen for hvert av de tre områdene hvor den potensielle energien er konstant.

b) Formulér betingelsene egenfunksjonene må tilfredsstille i dette tilfelle. Gi et begrunnet svar.

c) Finn transmisjonskoeffisienten T for fluksen gjennom det totale system fra $x < 0$ til $x > a$ når det forutsettes at

$$k_2 a = 3\pi, \quad \text{hvor:} \quad k_2 = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2mE} \quad \text{og} \quad k_3 a = \pi, \quad \text{hvor:} \quad k_3 = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(E - V_3)}$$

Kort fasit

a)

$$\begin{aligned}
x < 0, \quad \psi_1(x) &= A\exp(ik_1x) + B\exp(-ik_1x), \quad k_1 &= \frac{\sqrt{2m(E-V_1)}}{\hbar^2} \\
0 < x < a, \quad \psi_2(x) &= C\exp(ik_2x) + D\exp(-ik_2x), \quad k_2 &= \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar^2} \\
x > 0, \quad \psi_3(x) &= F\exp(ik_1x) \quad k_3 &= \frac{\sqrt{2m(E-V_3)}}{\hbar^2}
\end{aligned}$$

b) Se læreboka *Brehm and Mullin: Introduction to the structure of matter*, avsnitt 5.1 og 5.2

c) Transmisjonen fra $x < 0$ til $x > a$

$$T = \frac{k_3}{k_1}\left|\frac{F}{A}\right|^2 = \frac{4k_1k_3}{(k_1 + k_3)^2}$$

Oppgave 6.7, Eksamen H-1996

I denne oppgaven skal vi analysere et system bestående av en strøm partikler med masse m og kinetisk energi $E_k \ll mc^2$ som beveger seg fra $x = -\infty$ mot et potensialtrinn gitt ved

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{for} \quad x < 0 \\ -V_0 & \quad x \geq 0 \end{cases}$$

Vi skal først studere problemet utfra klassisk mekanikk.

a) Forklar kort partiklenes bevegelse og hva som skjer når de passerer potensialspranget i $x = 0$. Finn partiklenes kinetiske energi for $x > 0$.

La oss så studere problemet med utgangspunkt i Schrödingers kvantemekanikk.

b) Sett opp Schrödingerligningen og finn løsningene i området I $(x < 0)$ og i området II $(x > 0)$.

c) En kvantemekanisk bølgefunksjon må tilfredsstille visse generelle krav. Skriv ned og begrunn de krav som gjelder for den totale bølgefunksjonen i dette tilfelle.

d) Bruk prinsippene under c) til å finne de fullstendige bølgefunksjonene for systemet i hele området $-\infty < x < +\infty$.

e) Bestem refleksjonskoeffisienten R og transmisjonskoeffisienten T i punktet $x = 0$ som funksjon av partiklenes energi E. Vis at $R + T = 1$ og forklar det fysiske innholdet i denne enkle relasjonen.

Vi forandrer nå den potensielle energien til

$$V(x) = \begin{cases} 0 & x < 0 \\ -V_0 \quad \text{for} & 0 \leq x < a \\ +V_1 & x \geq a \end{cases}$$

hvor $V_0 > V_1 > 0$ og $E > V_1$.

f) Ta utgangspunkt i løsningen under b) og finn den generelle løsningen for hvert av de tre områdene.

g) Bruk kravene under c) til å finne den totale bølgefunksjon i hele området $-\infty < x < +\infty$

h) Finn den nye transmisjonskoeffisienten T for fluksen gjennom det totale system fra $x < 0$ til $x > a$ når det forutsettes at

$$\sqrt{\frac{2m(E+V_0)}{\hbar^2}} = \frac{3\pi}{a} \quad \text{og} \quad \sqrt{\frac{2m(E+V_1)}{\hbar^2}} = \frac{\pi}{a}$$

Finn refleksjonskoeffisienten R for det totale systemet. Beregn $R+T$ og gi en fysikalsk forklaring på svaret.

Kort fasit

a) Klassisk mekanikk: Partiklene fortsetter rett frem, men med øket hastighet. Den kinetiske energi for $x > 0$ blir $E_k + V_0$.

b) Schrödingerligningen for et intervall med konstant potensiell energi V er gitt ved

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V\right)\psi(x) = E_k\psi(x)$$

Dette gir løsningen

Området I:	$\psi_I(x) = A\exp(ik_Ix) + B\exp(-ik_Ix),$	$k_I = \sqrt{\frac{2mE_k}{\hbar^2}}$
Området II:	$\psi_{II}(x) = C\exp(ik_{II}x),$	$k_{II} = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E_k+V_0)}$

c) Se læreboka *Brehm and Mullin: Introduction to the structure of matter*, avsnitt 5.1, 5.2

d) Den totale $\psi(x)$ må være kontinuerlig og med kontinuerlig derivert i punktet $x = 0$. Dette gir følgende betingelser for konstantene

$$\frac{B}{A} = \frac{k_I - k_{II}}{k_I + k_{II}}, \quad \frac{C}{A} = \frac{2k_I}{k_I + k_{II}}$$

e) $R = (B/A)^2 = \left(\frac{k_I - k_{II}}{k_I + k_{II}}\right)^2$ og $T = (v_{II}/v_I)(C/A)^2 = \frac{4k_Ik_{II}}{(k_I+k_{II})^2}$. Dette gir $R + T = 1$.

f)

Området I:	$\psi_I(x) = A\exp(ik_Ix) + B\exp(-ik_Ix),$	$k_I = \sqrt{\frac{2mE_k}{\hbar^2}}$
Området II:	$\psi_{II}(x) = C\exp(ik_{II}x) + D\exp(-ik_{II}x),$	$k_{II} = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E_k+V_0)}$
Området III:	$\psi_{III}(x) = F\exp(ik_{III}x),$	$k_{III} = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E_k+V_1)}$

g) Den totale $\psi(x)$ må være kontinuerlig og med kontinuerlig derivert i punktene $x = 0$ og $x = a$. Dette gir følgende betingelser for konstantene

$$\frac{B}{A} = \frac{k_I - k_{III}}{k_I + k_{III}}, \qquad \frac{C}{A} = \frac{k_I}{k_{II}} \frac{k_{II} + k_{III}}{k_I + k_{III}}$$

$$\frac{D}{A} = \frac{k_I}{k_{II}} \frac{k_{II} - k_{III}}{k_I + k_{III}} \qquad \frac{F}{A} = \frac{2k_I}{k_I + k_{III}}$$

h) $R = (B/A)^2 = \left(\frac{k_I - k_{III}}{k_I + k_{III}}\right)^2$ og $T = \frac{4k_I k_{III}}{(k_I + k_{III})^2}$ Dette gir $R + T = 1$.

Oppgave 7.1, Eksamen H-1997

a) Gi en kort oversikt over de krav man stiller til den kvantemekaniske bølgefunksjonen $\psi(x)$, spesielt hva som kreves av bølgefunksjonen i en overgang hvor den potensielle energien $V(x)$ går fra en endelig verdi til $V(x) = \infty$.

I det følgende skal vi først se på et én–dimensjonalt problem: En partikkel med masse m beveger seg i et potensialfelt gitt ved

$$V(x) = \begin{cases} +\infty & & x < 0 \\ -V_0 & \text{for} & 0 \leq x < a \\ 0 & & x \geq a \end{cases}$$

med $V_0 > 0$.

b) Tegn en skisse som viser de karakteristiske trekk ved bølgefunksjonen $\psi_1(x)$ for grunntilstanden og bølgefunksjonen $\psi_2(x)$ for den første eksiterte tilstanden for det tilfelle at begge tilstandene er bundne.

c) I det følgende skal bredden a av den potensielle energien ha en slik verdi a_1 at energien for grunntilstanden blir $E_1 = -(1/2)V_0$.
Vis at

$$a_1 = \frac{3\pi\hbar}{4\sqrt{mV_0}}.$$

d) Vis at det ikke finnes bundne eksiterte tilstander når den potensielle energien har bredden a_1.

Vi skal nå behandle et tilsvarende problem i tre dimensjoner. I dette tilfelle er den potensielle energien gitt ved

$$V(x) = \begin{cases} -V_0 & \text{for} & 0 \leq x < a_1 \\ 0 & & x \geq a_1 \end{cases}$$

hvor a_1 er den samme konstanten som ble funnet i punkt c). Til hjelp i beregningen oppgir vi operatoren $\widehat{\nabla}^2$ i polarkoordinater

$$\widehat{\nabla}^2 = \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r - \frac{1}{\hbar^2 r^2} \widehat{\mathbf{L}}^2.$$

Her er $\widehat{\mathbf{L}}^2$ kvadratet av operatoren for banespinnet.

e) Skriv opp Schrödingerligningen for dette tilfelle. Vis at energi egenfunksjonene kan skrives på formen $(1/r)u(r)f(\theta,\phi)$ og forklar hvorfor de samtidig er egenfunksjoner $\widehat{\mathbf{L}}^2$. Vis at ligningen for $u(r)$ er gitt ved

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2u(r)}{dr^2} + V_{eff}(r)u(r) = Eu(r).$$

Finn uttrykket for $V_{eff}(r)$.

f) Finn de mulige energi egenverdiene som har $l = 0$ (s–tilstandene).

g) Tegn kurven for $V_{eff}(r)$ for $l \neq 0$ og forklar hvorfor det ikke finnes bundne tilstander når kvantetallet l for banespinnet er større enn 2.

Kort fasit

a) Se læreboka *Brehm and Mullin: Introduction to the structure of matter*, avsnitt 5.1, 5.2

b) For $0 \leq x \leq a : \psi_1(x) = A\sin(kx), k = \sqrt{mV_0/\hbar^2}$.
For $a < x : \psi_2(x) = B\exp(-\beta x), \beta = k$

c) Svaret er oppgitt i oppgaven.

d) Bølgefunksjonen for en mulig eksitert bunden tilstand med energi E er $\psi(x) \sim \sin(k^{'}x), k^{'} = \sqrt{2m(E+V_0)/\hbar^2}$. Siden $E < 0$ må $k^{'} < \sqrt{2mV_0)/\hbar^2}$ og argumentet i bølgefunksjonen i punktet $x = a_1$ blir $k^{'}a_1 = 3\pi/4\sqrt{2} \approx 1,06\pi$. Fra figuren fremgår det at vi må ha $k^{'}a_1 > 3\pi/2$. Følgelig ingen eksitert tilstand.

e) Siden den potensielle energi kun avhenger av r kan alltid bølgefunksjonen skrives som et produkt som angitt i oppgaven. Ligninger for $u(r)$ er som angitt i oppgaven med

$$\begin{aligned} V_{eff} &= \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} - V_0 \quad 0 \leq r \leq a_1 \\ V_{eff} &= \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} \quad a_1 < r \end{aligned}$$

f) $l = 0$ gir samme energi egenverdiligning og med samme randbetingelser som i det én–dimensjonale tilfellet og med samme egenverdi $-1/2V_0$.

g) For at vi skal få bundne tilstander må $V_{eff}(r = a_1) = \frac{l(l+1)\hbar^2}{2ma_1^2} - V_0 < 0$. For $l < 2$ er dette oppfylt.

Oppgave 7.5, Eksamen V-1993

Energi egenverdiligningen for et elektron i et hydrogén–atom er gitt ved

$$\widehat{\mathbf{H}}_0\psi_{nlm_l} = -E_0\frac{1}{n^2}\psi_{nlm_l},$$

hvor E_0 er en konstant.

a) Sett opp Hamilton–operatoren $\widehat{\mathbf{H}}_0$ og skriv ned hvilke betingelser kvantetallene n, l og m_l må oppfylle.

Kvantetallet m_l tilfredsstiller egenverdi–ligningen

$$\left(\frac{d^2}{d\phi^2} + m_l^2\right)\Phi(\phi) = 0.$$

b) Finn $\Phi(\phi)$ (normering er unødvendig) og vis hvilke betingelser randkravene for Φ gir på m_l.

Bølgefunksjonen for s-tilstanden med n = 2 er gitt ved

$$\psi_{200} = \sqrt{\frac{1}{8\pi a_0^3}}\left(1 - \frac{\rho}{2}\right)\exp(-\frac{\rho}{2}), \quad \rho = \frac{r}{a_0}$$

c) Vis at bølgefunksjonen er normert. (Forslag: Bruk $\int_0^\infty \rho^k e^{-\rho} d\rho = k!$, hvor k er et heltall.) Finn middelverdien (forventningsverdien) for radien $< r_{2,0,0} >$ og den radius som elektronet med størst sannsynlighet befinner seg i. Forklar kort hvorfor det er forskjell i disse to radiene.

Anta at Hamilton–operatoren har et ekstra ledd gitt ved

$$\widehat{\mathbf{H}}_1 = \frac{E_0}{16\hbar^2}\left(\widehat{\mathbf{L}}_x^2 + \widehat{\mathbf{L}}_y^2\right).$$

d) Finn egenverdiene for $\widehat{\mathbf{H}}_0 + \widehat{\mathbf{H}}_1$. Tegn alle energinivåene med $n = 1$ og 2 før og etter $\widehat{\mathbf{H}}_1$ leddet er innført. Hvilken degenerasjon har nivåene i de to tilfellene?

Kort fasit

a) Hamilton operatoren har formen

$$\widehat{\mathbf{H}}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\frac{1}{r}$$

hvor $n \geq 1$, $(n = 1, 2, 3, \ldots)$, $l \leq n - 1$, $(l = 0, 1, 2, \ldots, n - 1)$
og $|m_l| \leq l$, $(m_l = -l, -l + 1, \ldots, -1, 0, 1 \ldots, l - 1, l)$.

b) Løsningen er $\Phi(\phi) = Ce^{im_l\phi}$ og randkravet $\Phi(\phi) = \Phi(\phi + 2\pi)$ gir $m_l = 0, \pm1, \pm2, \ldots$.

c) Normering

$$N = \int \psi_{200}^* \psi_{200} \rho^2 a_0^3 sin\theta d\theta d\phi d\rho = 1$$

$$< r >= \frac{a_0}{2}\int_0^\infty (\rho^3 - \rho^4 + \frac{1}{4}\rho^5)e^{-\rho} d\rho = 6a_0$$

For å finne den radius elektronet med størst sannsynlighet befinner seg i, tar utgangspunkt i $P = r^2 e^{-r/a_0}(2 - r/a_0)^2$ og krever $dP/dr = 0$. Det gir

$$r(2 - \frac{r}{a_0})(4 - 6\frac{r}{a_0} + \frac{r}{a_0}^2) = 0.$$

med følgende løsninger: $r_1 + 0$, $\;r_2 = 2a_0$, og $r_{3,4} = (3 \pm \sqrt{5})a_0$. Innsatt i likningen for P, finner vi at den r som gir maksimum er

$$r = r_3 = a_0(3 + \sqrt{5})$$

Forskjellen i r skyldes at fordelingen $P(r)$ er skjev (usymmetrisk) med hale for store r.

d) Vi kan omforme ekstraleddet til $\widehat{\mathbf{H}}_1 = (E_0/16\hbar^2)(\widehat{\mathbf{L}}^2 - \widehat{\mathbf{L}}_z^2)$. Dette gir egenverdiligningen

$$\left(\widehat{\mathbf{H}}_0 + \widehat{\mathbf{H}}_1\right)\psi_{nlm_l} = E_0\left(-\frac{1}{n^2} + \frac{1}{16}(l(l+1) - m_l^2)\right)\psi_{nlm_l}.$$

Dette gir energinivåer:

a) $n = 0,\ l = 0,\ ,m_l = 0,$ degenerasjon $= 1$
b) $n = 1,\ l = 0,\ ,m_l = 0,$ degenerasjon $= 1$
c) $n = 1,\ l = 1,\ ,m_l = 0,$ degenerasjon $= 1$
$n = 1,\ l = 1,\ ,m_l = \pm 1,$ degenerasjon $= 2$

Oppgave 7.6, Eksamen V-1994

Vi skal i denne oppgaver først se på et én–dimensjonalt kvantemekanisk problem. Bølgefunksjonen for grunntilstanden for en partikkel med masse m er gitt ved

$$\psi_0(x) = A\exp\left(-\frac{1}{2}a^2x^2\right).$$

hvor A er en normaliseringskonstant.

a) Sett opp energi egenverdiligningen for partikkelen og bestem den potensielle energien $V(x)$ som gir $\psi_0(x)$ som løsning for grunntilstanden. Finn grunntilstandsenergien E_0.

b) Finn normaliseringskonstanten A.

c) Vis at
$$\psi_1(x) = \sqrt{2}ax\psi_0(x)$$
også er løsning av egenverdiligningen under a). Finn den tilsvarende energien E_1.

d) Beregn $\langle\widehat{\mathbf{x}}\rangle$, $\langle\widehat{\mathbf{p}}\rangle$, $\langle\widehat{\mathbf{x}}^2\rangle$ og $\langle\widehat{\mathbf{p}}^2\rangle$ for grunntilstanden $\psi_0(x)$.

e) Uskarpheten for en operator i kvantemekanikken er definert ved
$$\Delta A = \sqrt{\langle\widehat{\mathbf{A}}^2\rangle - \langle\widehat{\mathbf{A}}\rangle^2}.$$
Bruk dette til å finne $\Delta x \cdot \Delta p$ for grunntilstanden $\psi_0(x)$. Kommentér resultatet.

Vi skal gå over til å studere problemet ovenfor i tre dimensjoner. Den potensielle energien $V(x)$ overføres til $V(r)$, i.e. samme funksjon, men nå avhengig av den radielle avstanden r.

f) Sett opp egenverdiligningen i det tre–dimensjonale tilfelle og vis at funksjonen
$$\Phi_{n,p,q}(x,y,z) = \psi_n(x)\psi_p(y)\psi_q(z),$$
er en løsning hvor $n, p, q = 0, 1, 2, \ldots$. Angi degenerasjonen for grunntilstanden og den første eksiterte tilstanden.

g) Egenfunksjonene i det tre–dimensjonale tilfellet vil samtidig være egenfunksjoner for banespinn operatorene $\widehat{\mathbf{L}}^2$ og $\widehat{\mathbf{L}}_z$. Finn verdier for kvantetallene l og m_l for operatorene $\widehat{\mathbf{L}}^2$ og $\widehat{\mathbf{L}}_z$ i grunntilstanden $\Phi_{0,0,0}$.

Kort fasit

a) $V(x) = (\hbar^2 a^4/2m)x^2$, $E_0 = (\hbar^2 a^2/2m)$.

b) $A = (a^2/\pi)^{1/4}$.

c) $E_1 = 3E_0$.

d) $< x >= 0, \;\; < p >= 0, \;\; < x^2 >= (1/2a^2), \;\; < p^2 >= (1/2)\hbar^2 a^2$

e) $\Delta x \cdot \Delta p = (1/2)\hbar$

f) Degenerasjonen av grunntilstand er 1, av 1. eksiterte 3.

g) $l = 0, \;\; m_l = 0$.

Oppgave 9.10, Eksamen H-1996

I den enkle skallmodellen (sentralfelt modellen) for fler–elektron atomer plasseres elektronene i tilstander som har de samme kvantetallene som energi egentilstandene for Hydrogen atomet:

$$1s; 2s, 2p; 3s, 3p, 3d; \ldots$$

a) Hvor mange elektroner kan det plasseres i hver av tilstandene $nl = 1s; 2s, 2p;\ 3s, 3p$ og $3d$;? Et hovedskall karakteriseres ved kvantetallet n. Finn hvor mange elektroner kan plasseres i et hovedskall som funksjon av kvantetallet n. Formulér det prinsipp som bestemmer hvor mange elektroner det kan være i hver tilstand.

b) Natrium (Na) atomet har 11 elektroner. Bruk den enkle skallmodellen for elektronene ti å bestemme elektronenes grunntilstandskonfigurasjon. Grunntilstanden karakteriseres også ved kvantetallene $L,\ S,\ J$ satt sammen i termsymbolet $^{2S+1}L_J$. Forklar hva kvantetallene betyr og finn termsymbolet for grunntilstanden.

I resten av denne oppgaven skal vi studere noen tilstander hvor det siste (valens) elektronet i Na er i en eksitert tilstand. I figur 1 er det vist energi nivåene for noen slike tilstander. For $3p$ og $4s$ nivåene er eksitasjonsenergien over $3s$ nivået oppgitt i eV.

c) Gi en kort forklaring på hvorfor p og d nivåene er splittet i to, mens s nivåene ikke er splittet.

d) Finn termsymbolet og beregn degenerasjonsgraden for hver av de eksiterte tilstandene.

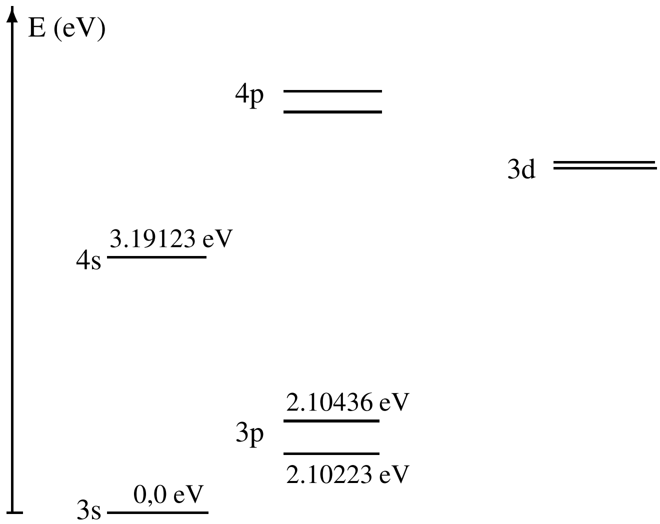
Vi tenker oss nå at Na atomet har valens elektronet i en $4s$ tilstand, og at det deretter ikke er påvirket av omgivelsene.

e) Gjør rede for de forskjellige elektriske dipol overganger som kan foregå før atomet er blitt stabilt. Hvilke utvalgsregler gjelder for slike prosesser?

f) Beregn bølgelengdene til de utsendte fotonene i de elektriske dipol overgangene.

Kort fasit

a) Den generelle formel for antall tilstander er $N(n,l) = 2n^2$
Pauliprinsippet: Bølgefunksjonen for N elektroner må være antisymmetrisk ved ombytning av to vilkårlige elektroner.
Pauliprinsippet i den enkle skallmodell: Ingen elektroner kan ha samme sett kvantetall.



Figur 1: Energitilstander for Na atomet.

b) Grunntilstanden for Na er: $1s^2 2s^2 2p^6 3s$. Kvantetallet L er det totale banespinn, S det totale egenspinn og J det totale spinn for systemet. For Na er $L = 0$, $S = J = 1/2$ som gir termsymbolet ${}^2S_{1/2}$.

c) Se læreboka *Brehm and Mullin: Introduction to the structure of matter*, avsnitt 8.9, Oppsplittingen skyldes spinn–bane kobling.

d) Tilstanden $3s$ har termsymbol ${}^2S_{1/2}$ med degenerasjonsgrad $= 2$.
Tilstanden $3p$(2.10223 eV) har termsymbol ${}^2P_{1/2}$ med degenerasjonsgrad $= 2$.
Tilstanden $3p$(2.10436 eV) har termsymbol ${}^2P_{3/2}$ med degenerasjonsgrad $= 4$.
Tilstanden $4s$ har termsymbol ${}^2S_{1/2}$ med degenerasjonsgrad $= 2$.
Tilstanden $3d$(laveste tilstand) har termsymbol ${}^2D_{3/2}$ med degenerasjonsgrad $= 4$.
Tilstanden $3d$(høyeste tilstand) har termsymbol ${}^2D_{5/2}$ med degenerasjonsgrad $= 6$.
Tilstanden $4p$(laveste tilstand) har termsymbol ${}^2P_{1/2}$ med degenerasjonsgrad $= 2$.
Tilstanden $4p$(høyeste tilstand) har termsymbol ${}^2P_{3/2}$ med degenerasjonsgrad $= 4$.

e) Utvalgsregler for dipoloverganger: Se læreboka *Brehm and Mullin: Introduction to the structure of matter*, avsnitt 7.5 Dette gir

$$4s_{1/2} \rightarrow 3p_{3/2} \rightarrow 3s_{1/2} \quad \text{og} \quad 4s_{1/2} \rightarrow 3p_{1/2} \rightarrow 3s_{1/2}$$

f) $4s_{1/2} \rightarrow 3p_{3/2}(2.10436\ eV)$ gir $\lambda = 1140.9\ nm$
$4s_{1/2} \rightarrow 3p_{1/2}(2.10223\ eV)$ gir $\lambda = 1138,7\ nm$
$3p_{3/2}(2.10436\ eV) \rightarrow 3s_{1/2}$ gir $\lambda = 589,2\ nm$
$3p_{1/2}(2.10223\ eV) \rightarrow 3s_{1/2}$ gir $\lambda = 589,8\ nm$

Oppgave 9.11, Eksamen H-1994

Vi skal i denne oppgaven studere en partikkel med masse m i tre–dimensjonal bevegelse. Oppgaven vil kreve bruk av $\bigtriangledown^2$ som i polarkoordinater kan skrives på formen

$$\bigtriangledown^2 = \frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}r + \frac{1}{r^2 \sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}$$

Vi antar først at partikkelen er fri, ingen potensiell energi.

a) Vis at $\psi = (N/r)\sin(kr)$ er en energi egenfunksjon, og finn energien E. N og k er konstanter.

b) Forklar hvorfor ψ er en s–tilstand, det vil si at banespinnet $L = 0$ (om origo).

c) Vis at det ikke finnes andre akseptable energi egenfunksjoner med $L = 0$ enn de som er definert i punkt a) med vilkårlig, reelle verdier på konstanten k.

Vi antar nå at partikkelens potensielle energi $V(r)$ er en ren funksjon av r definert ved

$$V(r) = \begin{cases} 0 & r < r_0, \\ \infty & r > r_0. \end{cases}$$

d) Finn nå partikkelens energi egentilstander med $L = 0$. Beregn normaliseringskonstanten.

I det følgende skal vi begrense oss til $L = 0$ tilstander. Systemet vi skal studere består nå av to nøytroner i tre–dimensjonal bevegelse og med potensiell energi $V(r)$ som angitt ovenfor. Vi antar ingen ekstra vekselvirkning mellom nøytronene.

e) Finn de to laveste to–partikkel energi egentilstandene og beregn energi egenverdien. Finn det totale egenspinn S for de to tilstandene.

Vi innfører nå en ekstra vekselvirkning mellom de to nøytronene gitt ved $V_S = a\hat{\hat{\mathbf{S}}}_1 \cdot \hat{\hat{\mathbf{S}}}_2$, hvor $\hat{\hat{\mathbf{S}}}_1$ og $\hat{\hat{\mathbf{S}}}_2$ er operatorene for nøytronenes egenspinn og a en positiv konstant.

f) Finn endringen i energi egenverdiene som denne vekselvirkningen gir for de to laveste energi egentilstandene funnet under punkt e).

Oppgave 10.4, Eksamen V-1992

Et diatomisk molekyl roterer med vinkelfart ω_r om en akse gjennom massemiddelpunktet og vinkelrett på forbindelseslinjen mellom atomkjernene. Atomene har masse m_1 og m_2, og avstanden mellom dem er R_0.

a) Finn treghetsmomentet I_{cm} for molekylet om rotasjonsaksen, uttrykt ved $R_0,\ m_1$, og m_2. Beregn det klassiske uttrykk for banespinnet L om samme akse og vis at rotasjons energien til molekylet blir

$$E_{rot} = \frac{L^2}{2I_{cm}}$$

Vi skal nå behandle molekylet kvantemekanisk.

b) Sett opp Hamilton operatoren for systemet og finn energi egenverdiene. Finn også et uttrykk for energi forskjellen mellom to nabo nivåer.

c) Et CO molekyl er observert til å absorbere et foton med frekvens $1,15 \times 10^{11}$ Hz. Dette svarer til en overgang fra grunntilstanden i CO molekylet til den første eksiterte rotasjons tilstand. Finn av dette molekylets treghetsmoment.

Et diatomisk molekyl kan også vibrere om likevektstilstanden R_0 langs forbindelseslinjen mellom atomkjernene. Avviket fra likevekt for hver atomkjerne kaller vi ξ_1 og ξ_2.

d) Skissér den potensielle energien til molekylet som funksjon av avstanden mellom atomkjernene. Vis at dette for små avvik fra likevekt tilnærmet fører til Schrödingerligningen

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2}{d\xi^2}\psi(\xi) + \frac{1}{2}K\xi^2\psi(\xi) = E_{vib}\psi(\xi),$$

Forklar størrelsene som inngår.

e) Skriv opp energi egenverdiene E_{vib} i vibrasjonsbevegelsen uttrykt ved størrelsene i ligningen ovenfor. Sett også opp uttrykket for vinkelfrekvensen ω_v for vibrasjonen. Hva blir energi forskjellen mellom to nabo nivåer? Hvorfor er laveste vibrasjonsenergi større enn null?

f) Still opp et uttrykk for molekylets totale energi egenverdier for en samtidig rotasjon og vibrasjons bevegelse.

Eksperimentelt er vinkelfrekvensen for et CO molekyl målt til $\omega_v = 4,03 \times 10^{14}\ s^{-1}$. En gass med CO molekyler blir utsatt for elektromagnetisk stråling med frekvenser i området $\nu = (1,0 \times 10^{12} - 1.0 \times 10^{14})\ s^{-1}$.

g) Hvilke utvalgsregler må være oppfylt når molekylene ved en elektrisk dipol overgang forandrer rotasjons/vibrasjons tilstand?

h) Gi eksempler på tillatte absorbsjons overganger og beregn den tilhørende absorbsjons energien.

Løsning

a) Vi velger origo i systemets tyngdepunkt. Tyngdepunkt- og relativ- koordinatene er da bestemt av ligningene

$$-m_1r_1 + m_2r_2 = 0, \quad r_1 + r_2 = R_0$$

som gir

$$r_1 = \frac{m_2}{m_1+m_2}R_0, \quad r_2 = \frac{m_1}{m_1+m_2}R_0$$

og systemetes treghetsmoment blir

$$I_T = m_1r_1^2 + m_2r_2^2 = \frac{m_1m_2}{m_1+m_2}R_0^2 = \mu R_0^2$$

hvor μ er den reduserte masse for de to partiklene.
Det klassiske uttrykket for banespinnet er gitt ved $\vec{L} = \vec{r}\times\vec{p}$. I rotasjon om tyngdepunktet blir

$$\begin{aligned} L &= r_1m_1v_1 + r_2m_2v_2 = r_1m_1r_1\omega + r_2m_2r_2\omega & (12)\\ &= (m_1r_1^2 + m_2r_2^2)\omega = \frac{m_1m_2}{m_1+m_2}R_0^2\omega & (13)\\ &= \mu R_0^2\omega = I_T\omega & (14)\end{aligned}$$

Det klassiske uttrykket for systemets rotasjonsenergi blir

$$\begin{aligned} H_{kl} &= \frac{1}{2}m_1v_1^2 + \frac{1}{2}m_2v_2^2 = \frac{1}{2}\mu R_o^2\omega^2 & (15)\\ &= \frac{1}{2\mu R_0^2}L^2 = \frac{1}{2I_T}L^2 & (16)\end{aligned}$$

b) Kvantemekanisk får vi

$$\widehat{\mathbf{H}} = \frac{1}{2I_T}(\widehat{\widetilde{\mathbf{L}}})^2$$

med egenverdiligning

$$\frac{1}{2I_T}(\widehat{\widetilde{\mathbf{L}}})^2\psi = E_l\psi = \frac{1}{2I_T}l(l+1)\hbar^2\psi$$

med kvantetallet $l = 0, 1, 2, \ldots$. Energiavstanden mellom to nabo nivåer blir

$$\Delta E_l = E_l - E_{l-1} = \frac{\hbar^2}{2I}[l(l+1) - (l-1)l] = \frac{\hbar^2}{I}l$$

c) Overgangen fra grunntilstanden til det første eksiterte $l = 1$ tilstanden gir

$$E_f = hf = E_1 - E_0 = \frac{\hbar^2}{I_T}$$

sombestemmer systemets treghetsmoment til

$$I_T = \frac{h}{4\pi^2 f} = 1,46 \times 10^{-46} \text{ kg m}^2$$

d) Det klassiske likevektspunktet for molekylet bestemmes av

$$\left(\frac{dV(R)}{dR}\right)_{R=R_0} = -\alpha\beta e^{-\beta R_0} + \frac{k}{R_0^2} = 0$$

Vi velger $V(R_0) = 0$ og rekkeutvikler omkring $R = R_0$ (det svarer til $\xi = 0$)

$$V(\xi) \approx \frac{1}{2}\xi^2\left(\frac{dV}{d\xi^2}\right)_{\xi=0} = \frac{1}{2}k\xi^2$$

og Schrödinger ligningen får formen

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2}{dr^2}\psi(r) + \frac{1}{2}k\xi^2\psi(r) = E_{vib}\psi(r),$$

hvor μ er den reduserte masse og E_{vib} energi egenverdien.

e) Løsningen følger fremgangsmåten for en harmonisk oscillator

$$E_{vib}(n) = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega$$

med $\omega = \sqrt{\frac{k}{\mu}}$. Energi avstanden mellom to nabo nivå er

$$E_{vib}(n) - E_{vib}(n-1) = \hbar\omega$$

Systemet får en nullpunkts energi

$$E_{vib}(\text{grunntilstand}) = \frac{1}{2}\hbar\omega > 0.$$

f) Det totale energien blir

$$E = E_{rot} + E_{vib} = \frac{\hbar^2}{2I_T}l(l+1) + (n+1/2)\hbar\omega$$

g) Utvalgsreglene for elektrisk dipol overganger er $\Delta n = \pm 1, \quad \Delta l = \pm 1$ og $\Delta m_l = 0, \pm 1$.

h) Eksempel på overgang

$$(n=0, l=0) \longrightarrow (n=1, l=1): \quad \Delta E = 0,2657\ eV$$

Oppgave 10.5, Eksamen H-1993

Vi skal i denne oppgaven studere rotasjonstilstander i et to–atomig molekyl.

a) Gi en fysikalsk beskrivelse av et slikt roterende system og sett opp uttrykket for energi egenverdiene. Forklar de forskjellige størrelsene som inngår. Skissér energispektret for rotasjonstilstandene med tilhørende kvantetall.

Hvis et slikt to–atomig molekyl er i en eksitert tilstand gitt ved kvantetallet L for det totale banespinn, vil systemet deeksitere og gå over til en lavere tilstand med totalt banespinn $L - 1$ ved utsendelse av et foton.

b) Vis at frekvensspektret som oppstår når et slikt roterende to–atomig molekyl de–eksiterer ned til grunntilstanden, er ekvidistant, dvs. at spektral linjene har konstant avstand.

c) For molekylet HCl tilsvarer denne frekvensdifferansen en energi 2.62×10^{-3} eV. Hva er treghetsmomentet I for dette molekylet?

d) Anta at masse for et H–atom er $1\,u$ og massen for Cl er $35\,u$ og beregn avstanden mellom disse to atomene i molekylet.

Kort fasit

a,b) Se læreboka *Brehm and Mullin: Introduction to the structure of matter*, avsnitt 10.6 og 10.8 fig 10.16

c) For overganger mellom den første eksiterte tilstand med $L = 1$ og grunntilstanden kan vi bestemme treghetmoment parameteren ved

$$\Delta E = \frac{2\hbar^2}{2I} \longrightarrow I = \frac{\hbar^2}{\Delta E} = \underline{2,65 \times 10^{-47}\ kg\ m^2}.$$

d) Avstanden mellom H og CL atomene bestemmes ved

$$I = \mu r_0^2 = \frac{M_H M_{Cl}}{M_H + M_{Cl}} r_0^2 = \frac{1u35u}{36u} r_0^2 \longrightarrow r_0 = \underline{1,26 \times 10^{-10}\ m}.$$

Oppgave 10.6, Eksamen H-1994

Vi har et system av to protoner og et elektron. Dette svarer til partiklene i molekyl–ionet H_2^+. Protonene regner vi som klassiske partikler som er i ro, avstanden mellom dem kaller vi R. Elektronets avstand fra protonene kaller vi r_a og r_b. I oppgaven får vi bruk for å vite at ionisasjonsenergien for et hydrogén atom i grunntilstanden er 13.6 eV.

a) Lag en skisse som beskriver systemet og hvor R, r_a og r_b inngår. Skriv opp den kvantemekaniske Hamilton operatoren $\widehat{\mathbf{H}}$ for systemet. Vi ser her bort fra den kinetiske energien for protonene.

Vi antar nå at protonene er i ro i en innbyrdes avstand R og lar E betegne den <u>laveste</u> energi egenverdien av $\widehat{\mathbf{H}}$ for denne avstanden. E blir da en funksjon av R, $E = E(R)$.

b) Skissér kurven $E(R)$ som funksjon av R. Hvilken verdi har E når $R \longrightarrow \infty$? Når R velges meget liten (i forhold til elektronets bohr–radius) er E tilnærmet gitt ved

$$E = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 R} - 54,4 \text{ eV}$$

Forklar dette.

c) Elektronets bølgefunksjon i H_2^+ ionet vil enten ha like eller odde paritet. Forklar hva dette betyr. Tilnærmet kan vi beskrive elektronets bølgefunksjon ved å bruke hydrogén atomets elektron bølgefunksjoner $\psi_{nlm}(\vec{r})$. Vis hvordan dette gjøres for de to tilfellene med henholdsvis like og odde paritet.

d) Diskutér hvilken av de to mulighetene som svarer til grunntilstanden og tegn en skisse som viser sannsynlighetstettheten for elektronet langs molekylaksen for hver av de to tilfellene.

Kort fasit

a) Se læreboka *Brehm and Mullin: Introduction to the structure of matter*, avsnitt 10.1 og fig 10.2

b) $E(R) < 0$ og vokser eksponentielt mot grensen -13.6 eV for $R \to \infty$. Dette svarer til at elektronet er bundet til et av protonene som et hydrogénatom. $E(R) \to -\infty$ for $R \to 0$ pga. coulomb frastøtning mellom protonene.
For R liten og endelig får vi coulomb frastøtning $(e^2/4\pi\varepsilon_0 R)$, mens elektronets bindingsenergi til protonene svarer til 4 ganger energien i et hydrogén atom $4 \cdot (-13,6)$ eV.

c)d) Se læreboka *Brehm and Mullin: Introduction to the structure of matter*, avsnitt 10.1