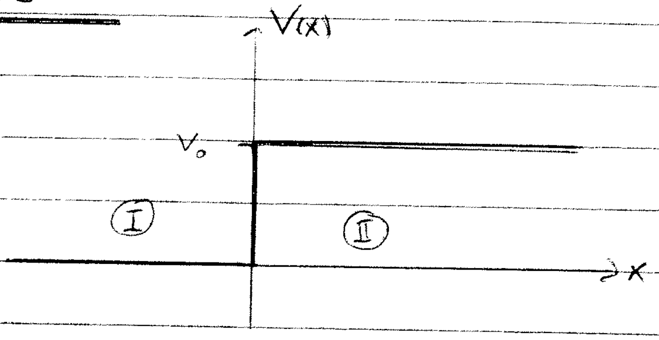
Fys 2140 V09 - FASIT

OPPGAVE 1



a) $V(x) = \begin{cases} 0, & x < 0 \\ V_0, & x \geq 0 \end{cases}$

Krav i $x=0$: $\psi_I(0) = \psi_{II}(0)$ (KONTINUITET)

$\psi_I'(0) = \psi_{II}'(0)$ (KONT. DERIVERT)

b) SL: $\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right]\psi(x) = E\psi(x)$

I: $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi_I = E\psi_I$

$\Rightarrow \frac{d^2\psi_I}{dx^2} = -k^2\psi_I$ der $k = \sqrt{2mE}/\hbar$

$$\Rightarrow \psi_I(x) = \underbrace{Ae^{ikx}}_{\substack{\text{høyregående} \\ \text{planbølge } (p=+\hbar k)}} + \underbrace{Be^{-ikx}}_{\substack{\text{venstregående} \\ \text{planbølge } (p=-\hbar k)}}$$

II: $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_{II}}{dx^2} + V_0\psi_{II} = E\psi_{II}$ der $E < V_0$

$\Rightarrow \frac{d^2\psi_{II}}{dx^2} = \kappa^2\psi_{II}$ der $\kappa = \sqrt{2m(V_0-E)}/\hbar$

$\Rightarrow \psi_{II}(x) = Ce^{-\kappa x} + De^{\kappa x}$. Må sette $D=0$ pga normerbarhet

$\Rightarrow \underline{\psi_{II}(x) = Ce^{-\kappa x}}$

1 c)

Kontinuitet: $\psi_I(0) = \psi_{II}(0) \Rightarrow A + B = C$

Kont. der.: $\psi_I'(0) = \psi_{II}'(0) \Rightarrow ik(A-B) = -\varkappa C$

Kombinerer: $\varkappa(A+B) = \varkappa C = -ik(A-B)$

$$\Rightarrow A(\varkappa + ik) = -B(\varkappa - ik) \Leftrightarrow \underline{\underline{A\left(1+\frac{ik}{\varkappa}\right) = -B\left(1-\frac{ik}{\varkappa}\right)}} \quad \checkmark$$

$$R = \left|\frac{B}{A}\right|^2 = \frac{\left|1+\frac{ik}{\varkappa}\right|^2}{\left|1-\frac{ik}{\varkappa}\right|^2} = \frac{1+(k/\varkappa)^2}{1+(k/\varkappa)^2} = \underline{\underline{1}} \quad \checkmark$$

<u>Full refleksjon siden $E < V_0$, så partikkelen kan ikke passere den (uendelig lange) potensialbarrieren.</u>

OPPGAVE 2

a) $\hat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(r)$ der $V(r) = -\frac{ke^2}{r}$ for Coulomb

$n = 1, 2, \ldots$ Hovedkvantetallet. Energikvantisering

$l \leq n-1$ Kvantisering av totalt ang. moment $\hat{L}^2$, egenverdier $\hbar^2 l(l+1)$

$|m_l| \leq l$ Kvantisering av L_z, egenverdier $m\hbar$

Degenerasjon for gitt n: $\underline{\underline{d(n) = n^2}}$ hvis vi ser bort fra spinn

b) $\hat{L}^2 \psi_{100} = 0$ fordi ψ_{100} bare avhenger av r, dvs $\frac{\partial \psi_{100}}{\partial \varphi} = \frac{\partial \psi_{100}}{\partial \theta} = 0$.

EGENTILSTAND:

$$\hat{H}\psi_{100} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2} r - \frac{1}{\hbar^2 r^2}\hat{L}^2\right]\psi_{100} - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\psi_{100}$$

der vi vet at $\hat{L}^2\psi_{100} = 0$. Starter med $\nabla^2\psi_{100}$

$$\Rightarrow \text{Ser på: } \frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}\left[r e^{-r/a_0}\right] = \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left[e^{-r/a_0} - \frac{r}{a_0}e^{-r/a_0}\right]$$

$$= \frac{1}{r}\left[-\frac{2}{a_0} + \frac{r}{a_0^2}\right]e^{-r/a_0} = \underline{\left[-\frac{2}{ra_0} + \frac{1}{a_0^2}\right]e^{-r/a_0}}$$

$$\Rightarrow \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\right]\psi_{100} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\left[-\frac{2}{ra_0} + \frac{1}{a_0^2}\right]e^{-r/a_0} - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}e^{-r/a_0}\right]\cdot A$$

1/r TERMENE: $\left[\frac{\hbar^2}{ma_0} = \frac{\hbar^2}{m}\frac{me^2}{4\pi\varepsilon_0\hbar^2} = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\right]$ $\Rightarrow$ kanselleres!

$$\Rightarrow \hat{H}_0 \psi_{100} = -\frac{\hbar^2}{2ma_0}\psi_{100} = -\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{m^2e^4}{(4\pi\varepsilon_0)^2\hbar^4}\psi_{100} = -\frac{me^4}{2\hbar^2(4\pi\varepsilon_0)^2}\psi_{100}$$

Dette er grunntilstanden, med $\underline{\underline{E_0 = \frac{me^4}{2\hbar^2(4\pi\varepsilon_0)^2}}}$

c) $$1 \equiv \iiint d^3r\,|\psi_{100}|^2 = |A|^2 \int_0^\infty dr \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi d\theta\, r^2 \sin\theta \left(e^{-r/a_0}\right)^2$$

$$= 4\pi|A|^2 \int_0^\infty dr\, e^{-2r/a_0}\cdot r^2$$

$$= 4\pi|A|^2\left(\frac{a_0}{2}\right)^3 \int_0^\infty \rho^2 e^{-\rho}\, d\rho = 4\pi|A|^2\left(\frac{a_0}{2}\right)^3\cdot 2! = \pi a_0^3|A|$$

$\Rightarrow \underline{\underline{A = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}}}}$ der vi har valgt reell, positiv løsning. V

d) $$\langle r_{100}\rangle = \int_0^\infty dr \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi d\theta\, r^2\sin\theta \cdot r\, e^{-2r/a_0}\cdot\frac{1}{\pi a_0^3}$$

$$= 4\pi\cdot\frac{1}{\pi a_0^3}\cdot\left(\frac{a_0}{2}\right)^4 \int_0^\infty d\rho\cdot\rho^3 e^{-\rho} = \frac{a_0}{4}\cdot 3! = \underline{\underline{\frac{3}{2}a_0}}$$

Mest sannsynlige radius:

$$P(r) = r^2 R(r)^2 = r^2 e^{-2r/a_0}$$

$$\frac{dP}{dr} = \left(2r - \frac{2r^2}{a_0}\right)e^{-2r/a_0} \doteq 0 \quad \Rightarrow \quad \underline{\underline{r_{max} = a_0}}$$

$\langle r_{100}\rangle \neq r_{max}$ fordi den radielle sannsynlighetstettheten ikke er symmetrisk omkring makspunktet.

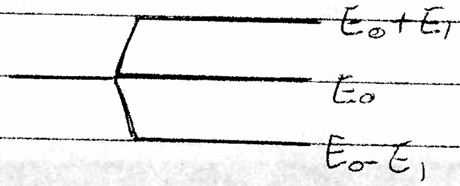
e) $\hat{H}' = \hat{H}_0 + \frac{eB}{2m_e}\hat{L}_z$

Ja. ψ_{nlm} er felles egentilstander for $\hat{H}_0$, $\hat{L}^2$ og $\hat{L}_z$, og er derfor egentilstander for lineærkombinasjoner av disse, som $\hat{H}'$ over.

Degenerasjonen $d(n) = n^2$ skyldes at energiene bare var avhengige av n, ikke l eller m. Zeemantermen $\hat{H}_1$ gir et $\hat{L}_z$- (dvs m_l-) avhengig bidrag til energien, dvs. splitter denne degenerasjonen.

1s: $n = l = m_l = 0$ $\Rightarrow$ ingen endring

2p: $n = 2$, $l = 1$, $m_l = -1, 0, 1$ $\Rightarrow$ nivået splittes opp i tre:



dvs $E_1 = \frac{eB\hbar}{2m_e}$

f) Lavest: Begge elektroner i ϕ_{100} $\Rightarrow$ Symmetrisk romdel $\Rightarrow$ Singlet

$$\psi_{100}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \phi_{100}(\vec{r}_1)\,\phi_{100}(\vec{r}_2) \cdot \underbrace{\chi_{s=0}}_{\{\uparrow\downarrow - \downarrow\uparrow\}}$$

Siden vi ser bort fra e-e vekselvirkningen, er totalenergien bare summen av én-partikkelenergiene,

$$E_0 = -2 \cdot \frac{4 \cdot 13{,}6\,eV}{1^2} = -8 \cdot 13{,}6\,eV \approx -109\,eV$$

2 g) Ett elektron i ϕ_{100}, ett i ϕ_{200}. Kan enten ha symm. romdel med antisymm. spinndel ($S=0$) eller antisymm. romdel med $S=1$.

1) $\psi_1(\vec{r}_1,\vec{r}_2) = \left[\phi_{100}(\vec{r}_1)\,\phi_{200}(\vec{r}_2) + \phi_{100}(\vec{r}_2)\,\phi_{200}(\vec{r}_1)\right] \cdot \chi_{S=0}$

$\hookrightarrow$ $\boxed{\text{SINGLET, } S=m_S=0}$

2) $\psi_1(\vec{r}_1,\vec{r}_2) = \left[\quad - \text{"} - \quad \div \quad - \text{"} - \quad\right] \cdot \chi_{S=1}$

$\hookrightarrow$ $\boxed{\text{TRIPLET } S=1;\ m_S=-1,0,1}$

EXCHANGE: Forventer lavest energi for alternativ 2: Antisymmetrisk romdel gir større forventningsverdi for avstanden mellom ~~..~~ elektronene enn symmetrisk romdel $\Rightarrow$ lavere Coulombenergi!