

**Løsningsforslag for avsluttende hjemmeksamen Vår 2020**  
**FYS2140 Kvantefysikk**  
**(torsdag 28. mai - fredag 5. juni)**

(Versjon 11. juni 2020)

**Oppgave 1: Kvantemekanikk**

Denne oppgaven behandler noen fundamentale egenskaper ved kvantemekanikken. Vi skal studere en partikkel med masse  $m$  i et én-dimensjonalt potensial  $V(x)$ .

- a) Sett opp den tidsavhengige Schrödingerlikningen (TASL) for systemet som bestemmer bølgefunksjon  $\Psi(x, t)$ . Forklar hva de ulike symbolene og leddene i likningen representerer.

**Svar:** Den tidsavhengige Schrödingerlikningen (TASL) er:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} + V(x)\Psi(x, t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t}, \quad (1)$$

hvor første ledd representerer partikkelens kinetisk energi og andre leddet representerer potensiell energi. Videre er  $\hbar = h/2\pi$  hvor  $h$  er Planck's konstant og  $i = \sqrt{-1}$ .

- b) Dersom vi har en stasjonær tilstand, vis at  $\Psi(x, t)$  kan skrives på formen  $\Psi(x, t) = \psi(x)\phi(t)$ . Forklar/begrunn stegene i utregningen.

**Svar:** Derivasjon mhp  $x$  og  $t$  virker bare hhv på  $\psi(x)$  og  $\phi(t)$  delen. Dermed kan de partiell-deriverte av  $\Psi(x, t) = \psi(x)\phi(t)$  skrives på formen:

$$\frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} = \phi \frac{d^2 \psi}{dx^2} \text{ og } \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} = \psi \frac{d\phi}{dt} \quad (2)$$

som innsatt i Likn. (1) og dividert med  $\psi\phi$  på begge sider, gir:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\psi(x)} \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + V(x) = i\hbar \frac{1}{\phi(t)} \frac{d\phi(t)}{dt}. \quad (3)$$

- c) Finn funksjonen  $\phi(t)$  og den tilhørende tidsuavhengige Schrödingerlikningen (TUSL). Hvilke krav stiller vi til bølgefunksjonen  $\psi(x)$ ?

**Svar:** Vi ser at venstre side av Likn. (3) bare avhenger av  $x$  og høyre side bare av  $t$ . Begge sidene må gi en og samme konstant som vi kaller  $E$ . For tidsdelen får vi:

$$i\hbar \frac{1}{\phi} \frac{d\phi}{dt} = E \Rightarrow \int \frac{d\phi}{\phi} = -\frac{i}{\hbar} \int E dt \Rightarrow \ln \phi = -\frac{i}{\hbar} Et + C' \Rightarrow \phi(t) = C \exp\left(-\frac{i}{\hbar} Et\right), \quad (4)$$

hvor  $C$ -ene er konstanter. Romdelen på venstre side av Likn. (3) gir oss den tidsuavhengige Schrödingerlikningen (TUSL):

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x), \quad (5)$$

hvor kravet til  $\psi$  er at den er energi-eigenverdifunksjonen for Hamiltonoperatoren med egenverdi  $E$ .

Vi ser nå på et kvantesystem med tre egenverditilstander  $\psi_1$ ,  $\psi_2$  og  $\psi_3$  som antas å være ortonormerte. De tilhørende energi-eigenverdier er  $E_1 = E$ ,  $E_2 = 2E$  og  $E_3 = 3E$ . Systemet er preparert ved tiden  $t = 0$  som

$$\Psi(x, 0) = A[-\psi_1(x) + 8\psi_2(x) + 2i\psi_3(x)]. \quad (6)$$

d) Finn normeringskonstanten  $A$  og sett opp systemets bølgefunksjon  $\Psi(x, t)$ .

**Svar:** Vi husker at  $\psi$ 'ene er ortonormerte og finner normeringsintegralet ved:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi(x, 0)^* \Psi(x, 0) dx = |A|^2 \int_{-\infty}^{\infty} (\psi_1^* \psi_1 + 64\psi_2^* \psi_2 + 4\psi_3^* \psi_3) dx = 69|A|^2 = 1, \quad (7)$$

hvor vi velger en reell positiv normeringskonstant  $A = 1/\sqrt{69}$ . Systemets bølgefunksjon ved tiden  $t$  er

$$\Psi(x, t) = \sqrt{\frac{1}{69}} \left[ -\psi_1(x)e^{-\frac{i}{\hbar}Et} + 8\psi_2(x)e^{-\frac{i}{\hbar}2Et} + 2i\psi_3(x)e^{-\frac{i}{\hbar}3Et} \right]. \quad (8)$$

e) Beregn forventningsverdien av energien  $\langle H \rangle$  i tilstanden  $\Psi(x, t)$ .

**Svar:** Vi husker her at  $(e^{-\frac{i}{\hbar}E_i t})^* e^{-\frac{i}{\hbar}E_i t} = e^{\frac{i}{\hbar}E_i t - \frac{i}{\hbar}E_i t} = e^0 = 1$  og får

$$\begin{aligned} \langle H \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(x, t)^* H \Psi(x, t) dx \\ &= \frac{1}{69} \int_{-\infty}^{\infty} (\psi_1^* E \psi_1 + 64\psi_2^* 2E \psi_2 + 4\psi_3^* 3E \psi_3) dx \\ &= \frac{141E}{69} = 2.04E. \end{aligned} \quad (9)$$

f) Beregn standardavviket av energien  $\sigma_H$  i tilstanden  $\Psi(x, t)$ .

**Svar:** Vi regner analogt med forrige oppgave:

$$\langle H^2 \rangle = \frac{1}{69} \int_{-\infty}^{\infty} (\psi_1^* E^2 \psi_1 + 64\psi_2^* 4E^2 \psi_2 + 4\psi_3^* 9E^2 \psi_3) dx = \frac{293E^2}{69} \quad (10)$$

og kan regne ut standardavviket som

$$\sigma_H = \sqrt{\langle H^2 \rangle - \langle H \rangle^2} = \frac{E}{69} \sqrt{293 \cdot 69 - 141^2} = 0.27E. \quad (11)$$

g) Hva kan du si om resultatet (verdi og sannsynlighet) av én energimåling på systemet?

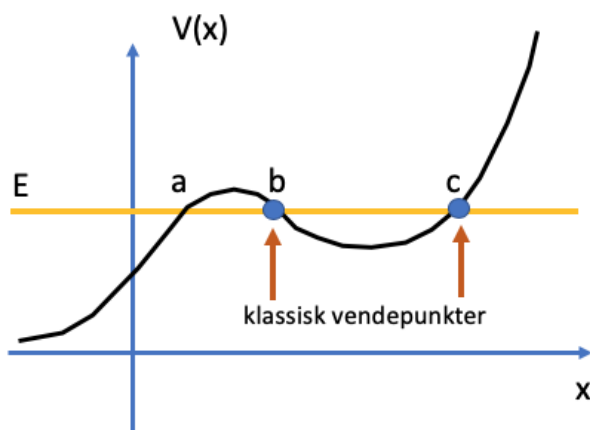
**Svar:** Koeffisienten foran egenfunksjonen i kvadrat ( $|c_i|^2$ ) gir sannsynligheten for å måle denne egentilstanden. Én energimåling gir enten energien  $E$  med  $1/69$  dels sannsynlighet, energien  $2E$  med  $64/69$  dels sannsynlighet eller energien  $3E$  med  $4/69$  dels sannsynlighet.

## Oppgave 2: Spredningstilstander

Vi vil i denne oppgaven studere potensialspredning av partikler.

- a) Lag en skisse av et tenkt potensial  $V(x)$  hvor en partikkel med totalenergi  $E$  er klassisk bundet, men i kvantefysikken representerer en spredningstilstand. Forklar med egne ord hva kvantefysisk tunnelling er.

**Svar:** Figur 1 illustrerer hvordan en klassisk partikkel vil bevege seg mellom vendepunktene b og c, og vil dermed være bundet. Kvantemekanisk er det en viss mulighet for at partikkelen befinner seg utenfor den lokale potensialbrønnen. Tilstanden kalles en spredningstilstand. Tunnelling oppstår når partikkelen kvantemekanisk “går gjennom” potensialbarrieren fra a til b, selvom den kinetiske energien da er negativ! Hvis vi venter uendelig lenge, vil partikkelen befinne seg utenfor den lokale potensialbrønnen og ikke lenger være bundet til systemet (endelig fri som fuglen, tjohei!).



Figur 1: Klassisk vil en partikkel forbli mellom b og c. Kvantemekanisk er det en viss sannsynlighet for at partikkelen går gjennom barrieren fra b til a. Tilstanden kalles en spredningstilstand.

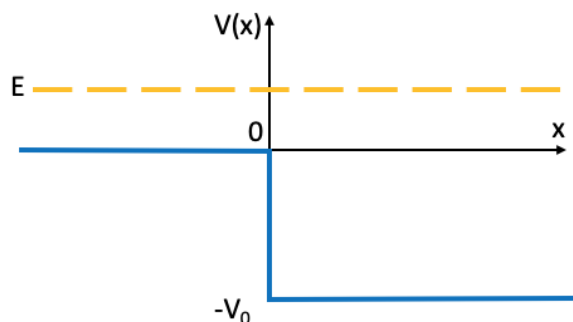
Vi tenker oss et annet potensial gitt ved

$$V(x) = \begin{cases} -V_0 & x \geq 0 \\ 0 & \text{ellers} \end{cases}, \quad (12)$$

hvor  $V_0 > 0$ . Initielt kommer partiklene med masse  $m$  og energi  $E$  inn fra venstre i Fig. 2.

- b) Når partiklene kommer inn fra venstre og passerer  $x = 0$ , hva skjer kvalitativt med størrelsen til hastigheten, den kinetiske energien og de Broglie-bølgelengden?

**Svar:** Hastigheten vil øke, den kinetiske energien vil øke og de Broglie-bølgelengden vil avta.



Figur 2: Spredningspotensial  $V(x)$  for partikler med energi  $E$ .

Vi vil nå beskrive spredningsproblemet i Fig. 2 kvantitativt. Slik som vi er vant til i kurset, skal du bruke planbølger med skarpe bølgetallsverdier, og ikke bygge opp fulle bølgepakker med kontinuerlige bølgetallsverdier.

- c) Sett opp Schrödingerlikningen og de generelle planbølgefunksjonene for området I ( $x < 0$ ) og området II ( $x \geq 0$ ). Bruk følgende planbølgeamplituder: Innkommende bølge  $A$ , reflektert bølge  $B$  og transmittert bølge  $C$ .

**Svar:** TUSL blir i de to tilfellene:

$$I : -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi + 0 = E\psi \Rightarrow \frac{d^2}{dx^2} \psi = k_I^2 \psi, \text{ med } k_I = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad (13)$$

$$II : -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi - V_0 = E\psi \Rightarrow \frac{d^2}{dx^2} \psi = k_{II}^2 \psi, \text{ med } k_{II} = \frac{\sqrt{2m(E + V_0)}}{\hbar}. \quad (14)$$

De tilhørende planbølger blir:

$$I : \psi_I = Ae^{ik_I x} + Be^{-ik_I x} \quad (15)$$

$$II : \psi_{II} = Ce^{ik_{II} x}, \quad (16)$$

der bølgene med amplituder  $A$  og  $C$  går mot høyre og bølgen med amplitude  $B$  går mot venstre.

- d) Finn forholdene mellom amplitudene  $|B/A|^2$  og  $|C/A|^2$  uttrykt ved hjelp av bølgetallene  $k$  i områdene I og II. Amplitudene  $A$ ,  $B$  og  $C$  er definert i oppgave c).

**Svar:** Vi bruker grensebetingelsene at bølgefunksjonene og deres deriverte skal være kontinuerlig i  $x = 0$ :

$$\psi_I(0) = \psi_{II}(0) \Rightarrow A + B = C \quad (17)$$

$$\psi'_I(0) = \psi'_{II}(0) \Rightarrow (A - B)k_I = Ck_{II}, \quad (18)$$

som gir

$$\left| \frac{B}{A} \right|^2 = \left( \frac{k_I - k_{II}}{k_I + k_{II}} \right)^2 \text{ og } \left| \frac{C}{A} \right|^2 = \left( \frac{2k_I}{k_I + k_{II}} \right)^2. \quad (19)$$

- e) Finn transmisjonskoeffisienten  $T$  og refleksjonskoeffisienten  $R$  hver for seg ved hjelp av bølgefunksjonenes amplituder og partiklenes hastigheter. Blir  $T + R = 1$  i dette tilfellet og hvorfor/hvorfor ikke?

**Svar:** Fluksen av innkommende partikler er  $v_I|A|^2$ , av reflekterte partikler  $v_I|B|^2$  og av transmitterte partikler  $v_{II}|C|^2$ , hvor  $v_I$  og  $v_{II}$  er partikkelhastighetene i områdene I og II. Dermed blir

$$R = \frac{v_I|A|^2}{v_I|B|^2} = \left| \frac{A}{B} \right|^2 = \left( \frac{k_I - k_{II}}{k_I + k_{II}} \right)^2 \quad (20)$$

$$T = \frac{v_{II}|C|^2}{v_I|A|^2} = \frac{k_{II}}{k_I} \left| \frac{C}{A} \right|^2 = \frac{4k_I k_{II}}{(k_I + k_{II})^2}, \quad (21)$$

som gir  $T + R = 1$ . Hvis ikke dette hadde vært oppfylt, ville ikke partikkeltallet vært bevart. Dette ville stride med forutsetningene i oppgaven.

### Oppgave 3: Uskarpheitsrelasjonen

Den generelle uskarpheitsrelasjonen er gitt ved

$$\sigma_A^2 \sigma_B^2 \geq \left( \frac{1}{2i} \langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle \right)^2, \quad (22)$$

hvor kommutatoren av operatorene  $\hat{A}$  og  $\hat{B}$  er gitt ved  $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$ .

- a) Vis at kommutatoren til posisjons- og bevegelesmengde-operatorene er gitt ved  $[x, \hat{p}] = i\hbar$  og at Heisenbergs uskarpheitsrelasjon  $\sigma_x \sigma_p \geq \hbar/2$  da kan utledes fra Likn. (22).

**Svar:** Operatoren for bevegelsesmengde er  $\hat{p} = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}$ . Vi anvender kommutatoren på en generell funksjon  $f(x)$  for å illustrere hvordan vi regner:

$$\begin{aligned} [x, \hat{p}]f(x) &= \frac{\hbar}{i} \left[ x \frac{d}{dx} f(x) - \frac{d}{dx} x f(x) \right] \\ &= \frac{\hbar}{i} \left[ x \frac{d}{dx} f(x) - (f(x) + x \frac{d}{dx} f(x)) \right] \\ &= -\frac{\hbar}{i} f(x) = i\hbar f(x). \end{aligned} \quad (23)$$

Vi innsetter  $[x, \hat{p}]$  for kommutatoren i Likn. (22):

$$\sigma_x \sigma_p \geq \left( \frac{1}{2i} \langle i\hbar \rangle \right) = \frac{\hbar}{2}. \quad (24)$$

Vi vil nå studere Heisenbergs uskarpheitsrelasjon for en partikkel i et én-dimensjonalt potensial. Grunntilstanden er gitt ved bølgefunksjonen

$$\psi_0(x) = A e^{-\frac{1}{2} a^2 x^2}, \quad (25)$$

hvor normeringskonstanten er gitt ved  $A = \sqrt[4]{\frac{a^2}{\pi}}$ .

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

**Svar:** Energi-egenverdikningen (TUSL) er:

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi_0(x) + V(x) \psi_0(x) &= E_0 \psi_0(x) & (26) \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} e^{-\frac{1}{2}a^2 x^2} + V(x) e^{-\frac{1}{2}a^2 x^2} &= E_0 e^{-\frac{1}{2}a^2 x^2} \\ -\frac{\hbar^2}{2m} (-a^2 + a^4 x^2) e^{-\frac{1}{2}a^2 x^2} + V(x) e^{-\frac{1}{2}a^2 x^2} &= E_0 e^{-\frac{1}{2}a^2 x^2} \\ -\frac{\hbar^2}{2m} (-a^2 + a^4 x^2) + V(x) &= E_0 \end{aligned}$$

Forat denne siste likningen skal gjelde for alle  $x$ , må  $V(x) = \hbar^2 a^4 x^2 / 2m$  som vi gjenkjenner som harmonisk oscillator. Dermed blir  $E_0 = \hbar^2 a^2 / 2m$ .

- c) Argumenter kort for at  $\langle x \rangle = 0$  og  $\langle p \rangle = 0$  og vis at  $\langle x^2 \rangle = 1/2a^2$  for grunntilstanden  $\psi_0(x)$ .

**Svar:** Potensialet er symmetrisk om  $x = 0$  som betyr at partikkelen befinner seg like mye på begge sider av  $x = 0$ . Videre vil partikkelen gå fram og tilbake med like stor sannsynlighet for positive og negative  $p$ . Altså forventer vi  $\langle x \rangle = 0$  og  $\langle p \rangle = 0$ . (Kan også formelt skrives opp vha integralene). Forventningsverdien av  $x^2$  blir:

$$\langle x^2 \rangle = |A|^2 \int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-a^2 x^2} dx = |A|^2 4\sqrt{\pi} \left(\frac{1}{2a}\right)^3 = \frac{1}{2a^2} \quad (27)$$

- d) Vi oppgir her at  $\langle p^2 \rangle = \hbar^2 a^2 / 2$ . Finn produktet av standardavvikene ( $\sigma_x \sigma_p$ ) for  $x$  og  $p$ . Kommentér resultatet.

**Svar:** Vi beregner

$$\sigma_x \sigma_p = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2} \sqrt{\langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2} = \sqrt{\langle x^2 \rangle \langle p^2 \rangle} = \sqrt{\frac{1}{2a^2} \frac{\hbar^2 a^2}{2}} = \frac{\hbar}{2}. \quad (28)$$

Grunntilstanden i harmonisk oscillator presenterer den minst mulige verdi for Heisenbergs uskarphetsrelasjon.

#### Oppgave 4: Degenerasjon i hydrogenatomet

Vi skal studere degenerasjonen i hydrogenatomet og ser bort fra elektronets egenspinn. Degenerasjonen  $d$  til et energinivå er gitt som antall tilstander som gir samme energi. Den tidsuavhengige Schrödingerlikningen uten eksterne krefter, kan skrives som

$$\hat{H}_0 \psi_{nlm_l}(\vec{r}) = E_n \psi_{nlm_l}(\vec{r}), \quad (29)$$

hvor  $\psi_{nlm_l}(\vec{r})$  er tilstandsfunksjonene og  $E_n = -E_0/n^2$  med  $E_0 = 13.6$  eV er energi-egenverdiene.

- a) Hvilke fysiske størrelser representerer  $\hat{H}_0$ ,  $\hat{L}^2$  og  $\hat{L}_z$ ?

**Svar:** Her er  $\hat{H}_0$  Hamiltonoperatoren for hydrogen, som representerer kinetisk og potensiell energi,  $\hat{L}^2$  er operatoren for kvadratet av det angulære moment og  $\hat{L}_z$  er det angulære moments projeksjon på  $z$ -aksen.

- b) Hvilke verdier kan kvantetallene  $n$ ,  $l$  og  $m_l$  anta? Forklar kort hvor de tillatte verdiene kommer fra (uten utledning og bevis).

**Svar:** Hovedkvantetallet  $n$  har verdier  $1, 2, 3, \dots$ . Kvantetallet  $l$  antar verdier  $l = 0, 1, \dots, n-1$  og  $m_l$  har verdier  $-l, -l+1, \dots, 0, 1, 2, \dots, l$ . De tillatte verdier kommer fra hydrogenets radiale bølgefunksjon  $R_{nl}(r)$  og de sfæriske harmoniske vinkelfunksjoner  $Y_l^{m_l}$  som bare er definert for visse gyldighetsområder av de 3 kvantetallene.

- c) Vis at degenerasjonen for energinivå  $E_n$  er  $d = n^2$ .

**Svar:** For en gitt  $n$  finnes  $n$  mulige  $l$  og for hver  $l$  finnes  $2l + 1$  mulige  $m_l$ .

$$d(n) = \sum_{l=0}^{n-1} (2l + 1) = 2 \sum_{l=0}^{n-1} l + \sum_{l=0}^{n-1} 1 = 2 \frac{n(n-1)}{2} + n = n^2. \quad (30)$$

Vi lar nå hydrogenatomet befinne seg i et homogent og konstant magnetfelt gitt ved  $B_z = 2m_e E_0 / 8e\hbar$  og velger  $z$ -aksen langs magnetfeltet.

- d) Vis at Hamiltonoperatoren er gitt ved

$$\hat{H}_1 = \hat{H}_0 + \frac{E_0}{8\hbar} \hat{\mathbf{L}}_z. \quad (31)$$

**Svar:** Tillegget i energi fra et eksternt magnetfelt (den normale Zeeman-effekt) er gitt ved  $-\vec{\mu} \cdot \vec{B} = (eB_z/2m_e)\vec{L}_z$ , som med oppgitt  $B_z$  og skrevet på operatorform, gir tilleggsleddet i Likn. (31).

- e) Vis at  $\psi_{n,l,m_l}$  representerer en tilstand med skarp energi også når magnetfeltet er tilstede og finn energi-egenverdien.

**Svar:** Vi merker oss at  $\psi_{n,l,m_l}$  er egenverdifunksjon for  $\hat{\mathbf{L}}_z$ , og får

$$\hat{H}_1 \psi_{n,l,m_l} = \hat{H}_0 \psi_{n,l,m_l} + \frac{E_0}{8\hbar} \hat{\mathbf{L}}_z \psi_{n,l,m_l} = -\frac{E_0}{n^2} \psi_{n,l,m_l} + \frac{E_0}{8} m_l \psi_{n,l,m_l} \quad (32)$$

med energi-egenverdi  $E_{n,m_l} = E_0(-1/n^2 + m_l/8)$ .

- f) Vi antar nå en annen Hamiltonoperator

$$\hat{H}_2 = \hat{H}_0 + \frac{E_0}{16\hbar^2} (\hat{\mathbf{L}}_x^2 + \hat{\mathbf{L}}_y^2). \quad (33)$$

Vis at  $\psi_{n,l,m_l}$  representerer en tilstand med skarp energi for  $\hat{H}_2$  og finn den tilhørende energi-egenverdien.

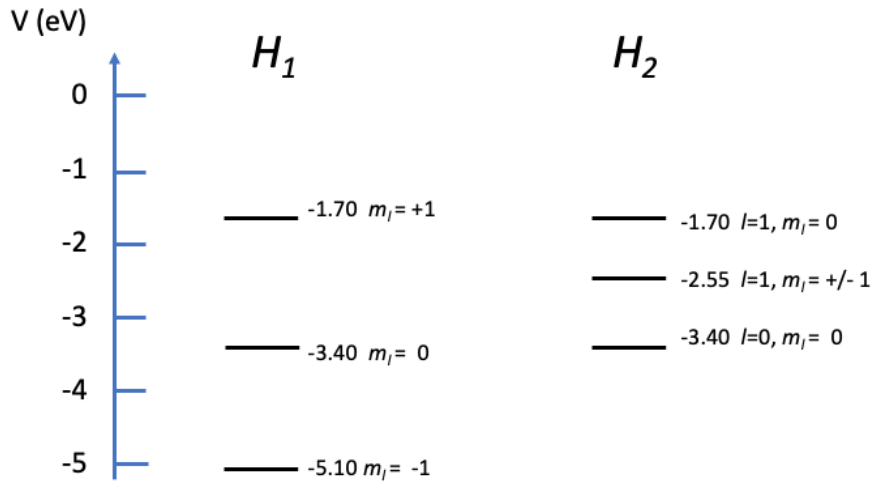
**Svar:** Vi merker oss at  $\hat{\mathbf{L}}_x^2 + \hat{\mathbf{L}}_y^2 = \hat{\mathbf{L}}^2 - \hat{\mathbf{L}}_z^2$ , og får

$$\hat{H}_2 \psi_{n,l,m_l} = \hat{H}_0 \psi_{n,l,m_l} + \frac{E_0}{16\hbar^2} (\hat{\mathbf{L}}^2 - \hat{\mathbf{L}}_z^2) \psi_{n,l,m_l} = -\frac{E_0}{n^2} \psi_{n,l,m_l} + \frac{E_0}{16} [l(l+1) - m_l^2] \psi_{n,l,m_l} \quad (34)$$

med energi-eigenverdi  $E_{n,l,m_l} = E_0[-1/n^2 + (l(l+1) - m_l^2)/16]$ .

- g) Tegn energinivåene for alle bundne  $n = 2$  tilstander for hver av de to Hamiltonoperatorene  $\hat{H}_1$  og  $\hat{H}_2$ .

**Svar:** Vi har  $n = 2$  som gir  $l = 0, 1$ . Figur 3 viser energinivåene med tilhørende kvantetall.



Figur 3: Energinivåer for Hamiltonoperatorene  $\hat{H}_1$  og  $\hat{H}_2$  med  $n = 2$ .

- h) Hvilken degenerasjon  $d$  har energinivået  $n = 3, l = 2$  og  $m_l = -2$  for hver av de to Hamiltonoperatorene  $\hat{H}_1$  og  $\hat{H}_2$ ?

**Svar:** Degenerasjonen for  $\hat{H}_1$  er  $d(3, 2, -2) = 1$ . Naivt sett så er degenerasjonen for  $\hat{H}_2$  er  $d(3, 2, -2) = 3$ , men dette systemet er ikke bundet siden  $E_{3,2,-2} = E_0[-1/9 + (6-4)/16] = 13.6(-1/9+1/8)\text{eV} = +0.18 \text{ eV}$ . Det betyr at tilstanden ikke eksisterer og at det er meningsløst å spørre om tilstandens degenerasjon.

### Oppgave 5: Sannsynlighetsfordelinger i hydrogenatomet

Schrödingerlikningen for hydrogenatomet er gitt ved

$$\hat{H}_0 \psi_{nlm_l}(\vec{r}) = E_n \psi_{nlm_l}(\vec{r}), \quad (35)$$

hvor  $\psi_{nlm_l}(\vec{r})$  er tilstandsfunksjonene og  $E_n = -E_0/n^2$  med  $E_0 = 13.6 \text{ eV}$  er energi-eigenverdiene. Vi ser bort fra egenspinn i denne oppgaven og skal i det påfølgende studere tilstanden  $\psi_{200}(\vec{r})$  hvor vi bruker polarkoordinater  $\vec{r} = (r, \theta, \phi)$ .



- a) Hva er energi-eigenverdien for  $\psi_{200}(\vec{r})$  tilstanden i eV, og hvilke andre bølgefunksjoner har samme energi.

**Svar:** Energi-eigenverdien er  $E_2 = -13.6 \text{ eV}/4 = -3.4 \text{ eV}$ . Det er tilsammen 4 tilstander med samme energi  $E_2$ , nemlig  $\psi_{200}$ ,  $\psi_{211}$ ,  $\psi_{210}$  og  $\psi_{21-1}$ .

- b) Forklar hvorfor bølgefunksjonen  $\psi_{200}(\vec{r})$  er uavhengig av  $\theta$  og  $\phi$ .

**Svar:** Bølgefunksjonen for hydrogen kan separeres som  $R_{nl}(r)Y_l^{m_l}(\theta, \phi)$  der den sfærisk harmoniske bølgefunksjon er gitt ved  $Y_0^0 = 1/\sqrt{4\pi}$ . Dermed er  $\psi_{200}(\vec{r})$  uavhengig av  $\theta$  og  $\phi$ .

Vi skriver opp den normerte bølgefunksjonen  $\psi_{200}$  ved hjelp av den dimensjonsløse variabelen  $\rho = r/a_0$  hvor  $a_0$  er Bohrradien.

$$\psi_{200}(\rho) = \sqrt{\frac{1}{8\pi a_0^3}} \left(1 - \frac{\rho}{2}\right) \exp\left(-\frac{\rho}{2}\right). \quad (36)$$

- c) Finn forventningsverdien av radien i egentilstanden  $\psi_{200}$ . Hint: du får bruk for formelen  $\int_0^\infty \rho^k e^{-\rho} d\rho = k!$  hvor  $k$  er et heltall.

**Svar:** Vi merker oss at  $\int_0^\pi \int_0^{2\pi} \sin\theta d\theta d\phi = 4\pi$  og regner ut forventningsverdien

$$\begin{aligned} \langle r \rangle &= \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \psi_{200}^*(\rho a_0) \psi_{200}(\rho^2 a_0^2) \sin\theta d\theta d\phi d(\rho a_0) \\ &= \frac{a_0}{8} \int_0^\infty (4\rho^3 - 4\rho^4 + \rho^5) e^{-\rho} d\rho \\ &= \frac{a_0}{8} (4 \cdot 3! - 4 \cdot 4! + 5!) = 6a_0. \end{aligned} \quad (37)$$

- d) Når vi skal se på ved hvilken radius elektronet med størst sannsynlighet befinner seg i, tar vi utgangspunkt i  $P(r) = r^2 e^{-r/a_0} (2 - r/a_0)^2$ . Finn den radius som elektronet med størst sannsynlighet befinner seg i.

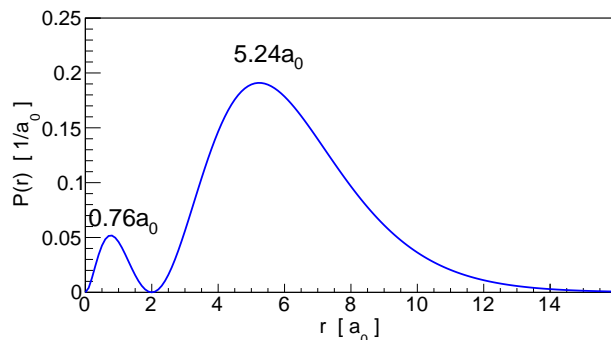
**Svar:** Vi krever  $dP/dr = 0$  og får

$$r\left(2 - \frac{r}{a_0}\right)\left(4 - 6\frac{r}{a_0} + \frac{r^2}{a_0}\right) = 0, \quad (38)$$

som gir løsninger  $r_1 = 0$ ,  $r_2 = 2a_0$  og  $r_3 = (3 \pm \sqrt{5})a_0$ . Innsatt i likningen for  $P$  finner vi størst sannsynlighet for  $r = a_0(3 + \sqrt{5})$ .

- e) Lag et plott av sannsynlighetstettheten som funksjon av radien og forklar utfra dette hvorfor de to radiene blir forskjellige. Bruk enhet  $a_0$  for radiusen  $r$  i plottet.

**Svar:** Vi plotter her  $\rho$  i enheter av  $a_0$ . Figur 4 viser at vi ikke har en symmetrisk sannsynlighetsfordeling. Fordelingen har en hale for høye radiuser og en økt sannsynlighetsfordeling omkring  $0.76a_0$  ved lave radiuser. Det ville være veldig usannsynlig at en slik usymmetrisk fordeling skulle ha en radius som elektronet med størst sannsynlighet befinner seg i ( $5.25a_0$ ) akkurat ved forventningsverdien  $6a_0$ .



Figur 4: Sannsynlighetstettheten for elektronet i tilstanden  $\psi_{200}$ . Fordelingen har maksimumsverdier for  $r = a_0(3 - \sqrt{5})$  og  $r = a_0(3 + \sqrt{5})$ .

### Oppgave 6: Atomkonfigurasjoner og egenspinn

Den totale bølgefunksjon for en partikkel inneholder ikke bare den romlige del  $\psi_{nlm_l}(\vec{r})$ , men også en spinn-bølgefunksjon (også kalt spinor)  $\chi_{s,m_s}$ .

- a) Hva kalles elementærpartikler med halvtallig og heltallig spinn? Hva er spesielt for mangepartikkelsystemer hvor partiklene har halvtallig spinn?

**Svar:** Fermioner har halvtallig spinn og bosoner har heltallig spinn. Fermioner lyder Paulis eksklusjonsprinsipp som betyr at ingen fermioner i systemet kan ha samme kvantetall.

- b) Hvilken verdi har spinn-kvantetallet  $s$  for elektronet og hvilke egenverdier har operatorene  $\hat{\mathbf{S}}^2$  og  $\hat{S}_z$ ?

**Svar:** Spinn-kvantetallet for elektronet er  $s = 1/2$ . Egenverdier har operatorene  $\hat{\mathbf{S}}^2$  og  $\hat{S}_z$  er henholdsvis  $\hbar^2 s(s+1)$  og  $\pm \hbar s$ .

- c) Anta at vi har vektorsummen  $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$  med  $l = 2$ . Hvilke projeksjoner av  $\mathbf{J}$  på  $z$ -aksen kan vi ha? Tegn et typisk eksempel på hvordan vektorene adderer seg opp.

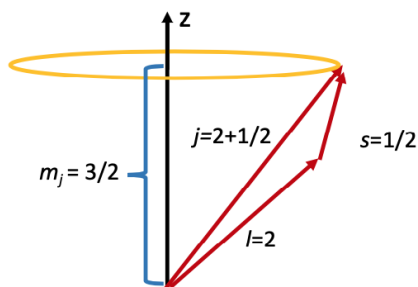
**Svar:** Den maksimale  $j$  er  $l + s = 5/2$ . Projeksjonen på  $z$ -aksen kan da være  $m_j = -5/2, -3/2, -1/2, +1/2, +3/2, +5/2$ . Figur 5 viser tilfellet med  $m_j = 3/2$ .

- d) Hvor mange elektroner kan plasseres i en spesifikk  $l$ -tilstand?

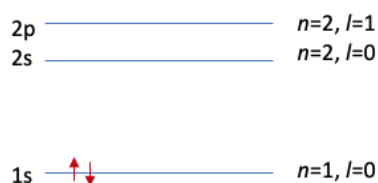
**Svar:** Vi har  $2l + 1$   $m_l$ -verdier og 2  $m_s$ -verdier som gir totalt  $2(2l + 1)$  elektroner.

- e) Forklar hvordan elektronkonfigurasjonen ser ut for grunntilstanden til nitrogenatom. Du kan ta utgangspunkt i Fig. 6 og fylle inn flere elektroner. Begrunn svaret ved hjelp av aktuelle regler for elektronfordeling i atomer.

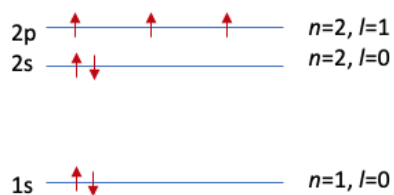
**Svar:** Nitrogen-elektronkonfigurasjonen er vist i Fig. 7. Når elektroner (som er fermioner) skal fylles inn i nivåene, må det tas hensyn til Paulis eksklusjonsprinsipp. Enkeltpartikelnivåene ordnes først og fremst etter hovedkvantetallet  $n$ . Dermed



Figur 5: Skisse av kopling  $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$  (ikke i skala).



Figur 6: Enkeltpartikkel-nivåskjema for helium med to elektroner med egenspinn opp og ned. De spektroskopiske symbolene  $s$  og  $p$  tilsvarer  $l = 0$  og  $l = 1$ .



Figur 7: Nitrogen med sine 7 elektroner plassert i  $1s$ ,  $2s$  og  $2p$  orbitalene.

kommer orbitaler med lavest  $l$  først fordi disse er nærmere kjernen enn høyere  $l$ -orbitaler (desto nærmere kjernen, desto mer binding). Når det gjelder spinnretning, fylles elektronene med samme spinnretning i en å samme orbital (Hund's regel) hvis Paulis eksklusjonsprinsipp tillater det.