Atom- og kjernefysikk

Kontinuasjonseksamen, august 1992

Løsningsforslag

Oppgave 1

<u>a</u> Klassisk: Med $E < V_0$ ville partikkelen reflekteres med 100% sikkerhet.

Sch. likn: $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x)$

$$\text{I \& III}: \quad -\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) = E\psi(x)$$

$$\text{II}: \quad -\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) = -(V_0 - E)\psi(x)$$

I område I: <u>Både</u> planbølge mot høyre (innkommende) og mot venstre (reflektert):

$$\psi_I = e^{ikx} + r e^{-ikx} \qquad k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

↑ koeff 1 pr. konvensjon

Område III: Bare planbølge mot høyre, slik grensebetingelsen er her:

$$\psi_{III} = t e^{ikx}$$

Område II: Både stigende og fallende eksponentialfunksjoner er tillatt på det <u>endelige</u> intervallet $(0,a)$:

$$\psi_{II} = \alpha e^{Kx} + \beta e^{-Kx} \qquad K = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}}$$

<u>b</u>: Grensebetingelser: $\psi(x)$ & $\psi'(x)$ kontinuerlige ($\Rightarrow j(x)$ kontinuerlig):

4 likn., 4 ukjente: α, β, r, t.

$$\psi_I(0) = \psi_{II}(0)\,; \quad \psi_I'(0) = \psi_{II}'(0)\,; \quad \psi_{II}(a) = \psi_{III}(a)\,; \quad \psi_{II}'(a) = \psi_{III}'(a)$$

Fysisk tolkning av r & t: $|r|^2 = R$ = sannsynligheten for refleksjon. $|t|^2 = T$ = sannsynligheten for transmisjon.

c I:

$$j_I = \frac{\hbar}{2im}\left\{ [e^{-ikx} + r^* e^{ikx}]\, ik\, [e^{ikx} - r e^{-ikx}] - \overset{\text{kompleks konjugert}}{cc.} \right\}$$

$$= \frac{\hbar}{2im}\left\{ (1-|r|^2)\, ik + \underbrace{\underbrace{\underbrace{(r^* e^{2ikx} - r e^{-2ikx})}_{2i\,\mathrm{Im}(r^* e^{2ikx})} ik}_{-2k\,\mathrm{Im}(r^* e^{2ikx})}}_{\text{reell}} - cc. \right\}$$

$$= \frac{\hbar k}{m}(1-|r|^2) \qquad \text{uavh. av } x! \quad \text{ok!}$$

II:

$$j_{II} = \frac{\hbar}{2im}\left\{ [\alpha^* e^{\kappa x} + \beta^* e^{-\kappa x}]\, \kappa\, [\alpha e^{\kappa x} - \beta e^{-\kappa x}] - cc. \right\}$$

$$= \frac{\hbar \kappa}{2im}\left\{ \underbrace{e^{2\kappa x}|\alpha|^2 - |\beta|^2 e^{-2\kappa x}}_{\text{reell}} - \alpha^*\beta + \alpha\beta^* - cc. \right\}$$

$$= \frac{2\hbar\kappa}{m}\,\mathrm{Im}(\alpha\beta^*) \qquad \text{uavh. av } x! \quad \text{OK!}$$

III:

$$j_{III} = \frac{\hbar}{2im}\left\{ t^* e^{-ikx}\, ik\, t\, e^{ikx} - cc. \right\}$$

$$= \frac{\hbar k}{m}|t|^2$$

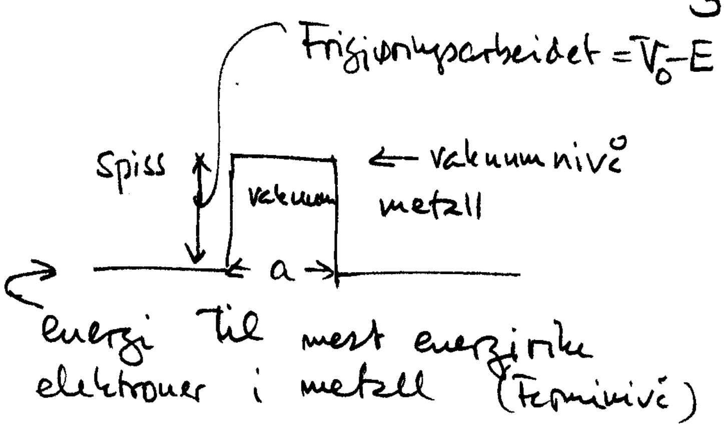
Partikkelbevarelse i stasjonært system $\left(\frac{\partial}{\partial t} = 0\right)$: $\frac{dj}{dx} = 0$.

$\Rightarrow j_I = j_{II} = j_{III}$ (alle uavh. av x!)

$\Rightarrow 1 - |r|^2 = |t|^2$ eller $R + T = 1$ refleksj. sanns. + transm. sanns. = 1 OK!

d

1-dim karikatur $\longrightarrow$



$$f = \frac{-1}{T}\frac{dT}{da} = -\frac{d\ln T}{da} = 2\kappa = 2\sqrt{\frac{2m(V_0-E)}{\hbar^2}}$$

$$= \frac{2}{1.055\cdot 10^{-34}}\cdot\sqrt{2\cdot 9.1\cdot 10^{-31}\cdot 4.3\cdot 1.6\cdot 10^{-19}}\ \ m^{-1}$$

$$= 21.1\cdot 10^{34}\cdot 10^{-25} = 2.1\cdot 10^{10}\,m^{-1}$$

$$\underline{f = 2.1\ Å^{-1}}$$

Strømmen $\sim$ dobles dersom avstanden spiss/metalloverfl. endres med 1 Å! God kontroll over strømmen $\Rightarrow$ meget nøyaktig avstandsbestemmelse!

Oppgave 2

a $\Psi(\vec{r}) = \psi(x)\,\phi(y)\,\chi(z)$ (pr. antakelse) $\Rightarrow$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(+\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\psi\phi\chi = E\,\psi\phi\chi$$

$$\Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\psi''(x)}{\psi(x)} - \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\phi''(y)}{\phi(y)} - \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\chi''(z)}{\chi(z)} = E$$

Dersom grensebetingelsene også separerer i x, y & z separeres hele problemet. Her

$$\psi(0) = \psi(L_1) = 0\ ;\ \phi(0) = \phi(L_2) = 0\ ;\ \chi(0) = \chi(L_3) = 0$$

$\Rightarrow$ Partikkel-i-éndimensjonal-boks i hver av de 3 retningene:

$$\Psi_{n_1 n_2 n_3}(\vec{r}) = \sqrt{\frac{8}{L_1 L_2 L_3}} \sin\frac{n_1 \pi x}{L_1} \sin\frac{n_2 \pi y}{L_2} \sin\frac{n_3 \pi z}{L_3}$$

$$E = E_{n_1, n_2, n_3} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \left\{ \left(\frac{n_1}{L_1}\right)^2 + \left(\frac{n_2}{L_2}\right)^2 + \left(\frac{n_3}{L_3}\right)^2 \right\}$$

$$n_1, n_2, n_3 = 1, 2, 3, \ldots$$

Grunntilstand med én partikkel i boksen

$$E_{1,1,1} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \left\{ \frac{1}{L_1^2} + \frac{1}{L_2^2} + \frac{1}{L_3^2} \right\}$$

$$\Psi_{1,1,1} = \sqrt{\frac{8}{L_1 L_2 L_3}} \sin\frac{\pi x}{L_1} \sin\frac{\pi y}{L_2} \sin\frac{\pi z}{L_3}$$

Degenerasjonsgraden er, generelt sett 1 ("ingen degenerasjon") for disse energinivåene. Bare ved spesielle forbindelser mellom lengdene L_1, L_2, L_3 får en degenerasjon.

$n_2 \rightleftarrows n_3$ invarians.

Ex $L_2 = L_3$ ny symmetri som gir degenerasjon

$L_1 = L_2 = L_3$ høyere symmetri $\Rightarrow$ mer deg.!

b. Pauli: Kun ett fermion pr. fullstendig spesifisert tilstand. Mao: Kun 0, 1 eller 2 elektroner pr. romtilstand. Med 2 elektroner i en romtilst. må ett ha spinn "opp", ett spinn "ned".

2b (forts) Med N elektroner i ($L_1 = N\ell$, $L_2 = L_3 = \ell$)-boksen har de to første elektronene (↑ & ↓) energi

$$E_{111} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2m}\left\{\frac{1}{(N\ell)^2} + \frac{1}{\ell^2} + \frac{1}{\ell^2}\right\}$$

De to neste

$$E_{211} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2m}\left\{\left(\frac{2}{N\ell}\right)^2 + \frac{1}{\ell^2} + \frac{1}{\ell^2}\right\}$$

osv., inntil elektronene $N-1$ & N, som har energien

$$E_{\frac{N}{2},1,1} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2m}\left\{\left(\frac{N/2}{N\ell}\right)^2 + \frac{1}{\ell^2} + \frac{1}{\ell^2}\right\} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2m}\left\{\frac{1}{4\ell^2} + \frac{1}{\ell^2} + \frac{1}{\ell^2}\right\}$$

$$= \frac{9}{8}\frac{\hbar^2\pi^2}{m\ell^2} \equiv E_F$$

c N_c^o: Ett elektron eksitert på tvers, dvs. $n_2 = 2, n_3 = 1$. Men dermed er det ingen ting (pr. Pauliprinsipp) i veien for at $n_1 = 1$! Tilstanden $\{1,2,1\} \neq \{1,1,1\}$! Altså

$$\Delta E_\perp = \frac{\hbar^2\pi^2}{2m}\left\{\frac{1}{(N\ell)^2} + \frac{4}{\ell^2} + \frac{1}{\ell^2}\right\} - E_F$$

Det elektronet som hadde høyest energi sparkes opp. Det er det billigste og gir derfor pr. def $\Delta E_\perp$

$$= \frac{\hbar^2\pi^2}{2m}\left\{\frac{1}{(N\ell)^2} + \frac{4}{\ell^2} + \frac{1}{\ell^2} - \left[\frac{1}{4\ell^2} + \frac{1}{\ell^2} + \frac{1}{\ell^2}\right]\right\}$$

$$\overset{N\gg1}{\simeq} \frac{\hbar^2\pi^2}{2m}\left\{\frac{16-1-4}{4\ell^2}\right\}$$

$$= \frac{11}{8}\frac{\hbar^2\pi^2}{m\ell^2}$$

Tall, med $\ell = 3\text{Å}$ (grovregning):

$$\Delta E_\perp = \frac{11}{8}\,\frac{(1\cdot10^{-34})^2\cdot 10}{9\cdot10^{-31}\cdot 9\cdot 10^{-20}}\,\text{J} \simeq 0.17\cdot 10^{-68+51} = 1.7\cdot10^{-18}\,\text{J}$$

Foton med $\lambda_1 = 4000\,\text{Å}$:

$$E_{\lambda_1} = h\nu_1 = hc/\lambda_1 = \frac{6.7\cdot10^{-34}\cdot 3\cdot 10^{8}}{4\cdot10^{-7}}\,\text{J} \simeq 5\cdot10^{-34+15}\,\text{J} = 5\cdot10^{-19}\,\text{J}$$

Synlig lys har tydeligvis for lite energi til på-tvers eksitering av elektronene

d. Tilsvarende, billigste eksitasjon "på langs":
elektronet med $\{N/2, 1, 1\}$ eksiteres til $\{N/2+1, 1, 1\}$
Altså:

$$\Delta E_{\parallel} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2m\ell^2N^2}\left\{(N/2+1)^2 - (N/2)^2\right\} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2m\ell^2N^2}\left\{N+1\right\} \approx \frac{\hbar^2\pi^2}{2m\ell^2 N}$$

For fotoner midt i det synlige spektret, med $\lambda_2 = 6000\,\text{Å}$, er energien

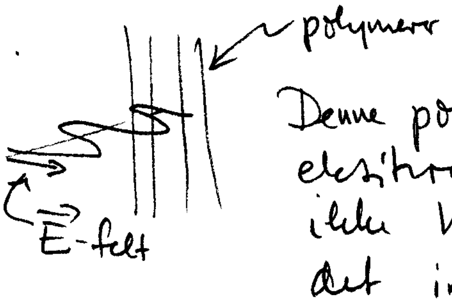
$$E_{\lambda_2} = hc/\lambda_2 = \frac{6.7\cdot 10^{-34}\cdot 3\cdot 10^{8}}{6\cdot 10^{-7}}\,\text{J} = 3.4\cdot 10^{-19}\,\text{J}$$

For at $E_{\lambda_2} = 50\,\Delta E_{\parallel}$ må N minst være N_0, der

$$3.4\cdot 10^{-19}\,\text{J} = 50\cdot\frac{(1\cdot 10^{-34})^2\cdot 10}{2\cdot 9\cdot 10^{-31}\cdot 9\cdot 10^{-20}\,N_0}\,\text{J}$$

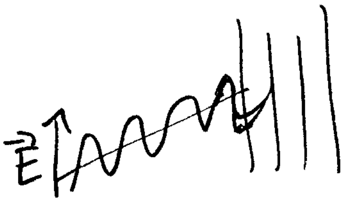
$$N_0 = 0.9\cdot 10^{-68+51+19} = 90$$

Altså: For polymerer som består av minst 100 (eller deromkring) monomerer, er $E_{\lambda_2} > 50\,\Delta E_{\parallel}$, med andre ord, fotonene ser et tilnærmet kontinuerlig elektronspektrum mht "på-langs" eksitasjon. Typisk er de aktuelle polymerene flere hundre monomerer lange.

e. 

Denne polarisasjonen av lyset kan bare eksitere "på tvers". Men siden ~~fotonene~~ ikke har tilstrekkelig energi, blir det ingen elektroneksitasjoner, intet energitap for fotonsystemet $\Rightarrow$ (fullstendig) transparens for dette (idealiserte) systemet

<u>2e</u> (forts.)



Denne polarisasjonen kan bare ~~polari~~ eksitere "på langs". Har nok energi, og nivåforskjeller som passer finnes alltid. ⇒ Elektron-eksitasjon under fotonabsorbsjon ⇒ Materialet blir ugjennomsiktig for denne polarisasjonsretningen.

For at på-langs overganger skal være tillatte, må

① $E_\lambda = E_f - E_i$

↑ abs. foton ↖ elektron energier i slutt- (f) og begynn- (i) tilstand.

Siden nivåene i på-langs spektret ligger meget tett finnes alltid to nivåer (ett fylt, ett tomt) som oppfyller denne likningen. Vi trenger jo ikke nødvendigvis eksitere elektroner fra det <u>øverste</u> nivået, ved E_F!

② Ved dipolovergangar ~~når~~ matrikselementet

$$M_{fi} = \int_{-L/2}^{L/2} dx\, \psi_f^*(x)\, x\, \psi_i(x) \neq 0 .$$

Siden $\psi_f(x)$ og $\psi_i(x)$ <u>enten</u> er odde eller <u>like</u> i x, er $M_{fi} \neq 0$ <u>bare</u> dersom ψ_f og ψ_i har <u>forskjellig</u> paritet.

[Men for "partikkel-i-boks" trenger <u>ikke</u> $n_f = n_i \pm 1$! Derimot vil M_{fi} falle langsomt av med økende $|n_f - n_i|$.]

Oppgave 3

a Mulige egenverdier

$I^2: \quad \hbar^2 i(i+1) \;;\quad i = 0, 1, \cdots$

$L^2: \quad \hbar^2 \ell(\ell+1) \;;\quad \ell = 0, 1, \cdots$

$S_p^2: \quad \hbar^2 s_p(s_p+1) = \frac{3}{4}\hbar^2 \;;\quad s_p = \frac{1}{2}$

$S_n^2: \quad \hbar^2 s_n(s_n+1) = \frac{3}{4}\hbar^2 \;;\quad s_n = \frac{1}{2}$

$S^2: \quad \hbar^2 s(s+1) \;;\quad s = 0, 1$

$I_z: \quad \hbar m_i \;;\quad m_i: -i, -i+1, \cdots, +i$

$L_z: \quad \hbar m_\ell \;;\quad m_\ell: -\ell, -\ell+1, \cdots, \ell$

$S_{pz}: \quad \frac{1}{2}\hbar, \; -\frac{1}{2}\hbar$

$S_{nz}: \quad \frac{1}{2}\hbar, \; -\frac{1}{2}\hbar$

$S_z: \; -\hbar, 0, \hbar \qquad (\hbar m_s \;;\; m_s = -s, -s+1, \cdots s)$

Mulige spinntilstander, i prinsipp, før vekselvirkningen er tatt hensyn til, for deuteronet

$$\chi = \frac{1}{\sqrt{2}}(\uparrow\downarrow - \downarrow\uparrow) \qquad \text{spinn singlett} \quad (s=0)$$

$$\chi = \begin{cases} \uparrow\uparrow \\ \frac{1}{\sqrt{2}}(\uparrow\downarrow + \downarrow\uparrow) \\ \downarrow\downarrow \end{cases} \qquad \text{spinn triplett} \quad (s=1)$$

b. $l=0$ $\quad (\Rightarrow \vec{L}=0 \;,\; \vec{I}=\vec{S})$

$${}^1S_0 \,,\quad {}^3S_1$$

$s=0, i=0 \qquad s=1, i=1.$

$l=1$ $\qquad |s-l| \leq i \leq s+l$

$${}^1P_1 \,,\qquad {}^3P_0 \,,\; {}^3P_1 \,,\; {}^3P_2$$

$s=0,\ l=i=1$

$l=2$ $\qquad |s-l| \leq i \leq s+l$

$${}^1D_2 \,,\qquad {}^3D_1 \,,\; {}^3D_2 \,,\; {}^3D_3$$

$s=0,\ l=i=2$

c. Positiv paritet $\Rightarrow l=0$ eller $l=2$, ikke $l=1$.

$i=1$:

$${}^3S_1 \;\;\&\;\; {}^3D_1 \qquad \Rightarrow \quad \psi_{\text{grunntilst}} = c_s\,{}^3S_1 + c_d\,{}^3D_1$$

Siden l ikke er et "godt kvantetall", men vingler mellom $l=0$ og $l=2$, kan ikke banedreieimpulsen $\vec{L}$ være bevart. Mao: Vekselvirkningspotensialet mellom p og n kan ikke være kulesymmetrisk. (Ikke stort avvik, $|c_d|^2 \sim 0.05\,|c_s|^2$.)

Tydeligvis er spinnvv. også viktige, siden bare spinntripletten er realisert.