

Atom- og kjemefysikk
 Eksamen 10.06.93
 Løsningsforslag

Oppgave 1

a $|\psi(x)|^2 =$ sannsynlighetstettheten for å finne partikkelen ved x

(forutsett normering: $\int dx |\psi(x)|^2 = 1$)

For operatoren \hat{F}_{op} tilordnet den klassiske dynamiske variable $F(x, p)$ er forventningsverdien i tilstand $\psi(x)$

$$\langle F \rangle = \int dx \psi^* \hat{F}_{op} \psi$$

Eksempler:

① Kinematisk energi $K = \frac{p^2}{2m} \rightarrow K_{op} = \frac{P_{op}^2}{2m} = \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \right)^2$
 Altså

$$\begin{aligned} \langle K \rangle &= \int dx \psi^*(x) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) \psi(x) \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \int dx \psi^*(x) \psi''(x) \end{aligned}$$

② Potensiell energi $V(x) \rightarrow V_{op} = V(x)$

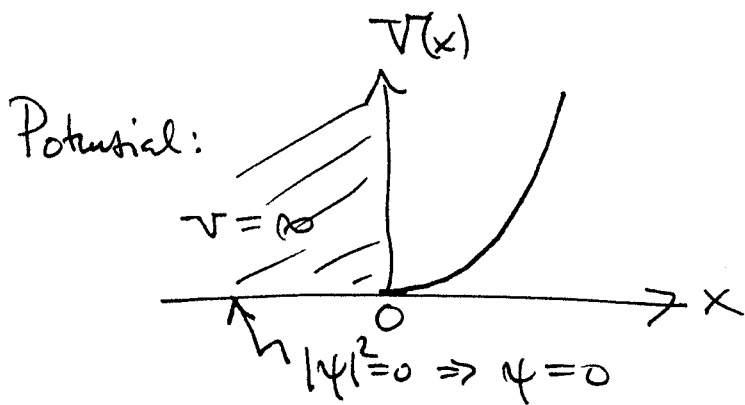
$$\langle V \rangle = \int dx \psi^*(x) V(x) \psi(x) = \int dx V(x) |\psi(x)|^2$$

b Grunnebetingelser:

$\psi(x)$ kontinuerlig

$\psi'(x)$ kontinuerlig, (med unntak av punkter der $V(x)$ springer fra en endelig verdi til uendelig).

$\psi(x)$ må falle av raskt nok for store $|x|$ til at $\int dx |\psi(x)|^2$ konvergerer slik at vi kan sette $\int dx |\psi(x)|^2 = 1$.



Grænsebetingelse: $ψ(0) = 0$
 $ψ'(0) = \text{vilkårlig}$

$ψ_A = e^{-αx^2}$ uakseptabel, da $ψ(0) \neq 0$

$ψ_B = x e^{-βx^2}$

$$\frac{d^2}{dx^2} ψ_B = \frac{d}{dx} (-2βx^2 + 1) e^{-βx^2} = (-4βx + 4β^2 x^3 - 2βx) e^{-βx^2}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} ψ_B'' + V ψ_B = E ψ_B \Rightarrow$$

$$\frac{\hbar^2}{2m} (6βx - 4β^2 x^3) + \frac{1}{2} m \omega_0^2 x^3 = E x$$

1 3 3 1 ← pot(x)

Potensler 1 & 3 må behandles separat:

$$3: \frac{2\hbar^2 \beta^2}{m} = \frac{1}{2} m \omega_0^2 \Rightarrow \beta^2 = \frac{m^2 \omega_0^2}{4\hbar^2} \Rightarrow \beta = + \frac{m \omega_0}{2\hbar}$$

(negativ β uakseptabel siden ψ må være normerbar)

$$1: \frac{3\hbar^2 \beta}{m} = E \Rightarrow E = \frac{3}{2} \hbar \omega_0$$

[Merk: Dette er nest laveste energinivå i den ordinære harmoniske oscillator.]

Altså: $ψ_B$ er en løsning med $\beta = \frac{m \omega_0}{2\hbar}$ og $E = \frac{3}{2} \hbar \omega_0$

$$\psi_c = x e^{-\gamma x}$$

$$\frac{d^2}{dx^2} \psi_c'' = \frac{d}{dx} (-\gamma x + 1) e^{-\gamma x} = (-\gamma + \gamma^2 x - \gamma) e^{-\gamma x}$$

Innsatt i Sch.l.

$$\frac{\hbar^2}{2m} (2\gamma - \gamma^2 x) + \frac{1}{2} m \omega_0^2 x^3 = E x$$

0 1 3 1

Umulig å få ψ_c $O(x^0)$ - og $O(x^3)$ -leddene til å kansellere. Derfor: $\psi_c(x)$ kan ikke være en løsning!

c Siden $V(-x) = V(x)$ i den ordinære harmoniske oscillator, må alle ^{energi-}eigenfunksjoner ha en bestemt paritet:

$$\psi_n: \quad \begin{array}{c} \psi_0 \\ \psi_1 \\ \psi_2 \end{array} \quad \dots$$

$$E_n: \quad \frac{1}{2} \hbar \omega_0 \quad \frac{3}{2} \hbar \omega_0 \quad \frac{5}{2} \hbar \omega_0 \quad \dots$$

Alle $\psi_{2n+1}(x)$ med $E_{2n+1} = \hbar \omega_0 (2n+1 + \frac{1}{2})$; $n=0,1,\dots$

er odde egenfunksjoner med $\psi_{2n+1}(0) = 0$, og oppfyller dermed grensebetingelsen i $x=0$ også for det halve oscillatorpotensialet i plot. b

For $x > 0$ er Sch.l. den samme for det hele og det halve oscillatorpotensialet, og alle ψ_{2n+1} for det hele pot. er derfor løsninger av Sch.l. for det halve. Dermed er alle energieigenverdier for pot. i plot b gitt ved formelen

$$E_{2n+1} = \hbar \omega_0 (2n + \frac{3}{2}) \quad ; \quad n=0,1,\dots$$

Gruntilstanden er gitt som ψ_B i plot b, med energieverdi $E_1 = \frac{3}{2} \hbar \omega_0$. [Vi kunne selvsagt omnummerert og skrevet $E_p = \hbar \omega_0 (2p + \frac{3}{2})$; $p=0,1,2,\dots$]

d De to laveste egentilstandene i potensialet i plot b har egenverdier $E_1 = \frac{3}{2}\hbar\omega_0$ og $E_3 = \frac{7}{2}\hbar\omega_0$. Vi har da en tidsavhengig linearkombinasjon på formen

$$\bar{\Psi}(x,t) = c_1 \psi_1(x) e^{-\frac{iE_1 t}{\hbar}} + c_3 \psi_3(x) e^{-\frac{iE_3 t}{\hbar}}$$

Sannsynlighets tetthet (når $\bar{\Psi}(x,t)$ antas normert til 1) er da

$$\begin{aligned} P(x,t) = |\bar{\Psi}(x,t)|^2 &= |c_1|^2 |\psi_1(x)|^2 + |c_3|^2 |\psi_3(x)|^2 \\ &+ c_1^* c_3 \psi_1^*(x) \psi_3(x) e^{\frac{i(E_1 - E_3)t}{\hbar}} \\ &+ c_1 c_3^* \psi_1(x) \psi_3^*(x) e^{-\frac{i(E_1 - E_3)t}{\hbar}} \end{aligned}$$

Vi kan alltid velge energiegenfunksjonene reelle. Dersom $c_1 = |c_1| e^{i\alpha}$ og $c_3 = |c_3| e^{i\beta}$ vil dette bare gi en konstant fase i sluttsvarets cosinus. Når vi for enkelhets skyld setter $\alpha = \beta = 0$ får

$$P(x,t) = \underbrace{|c_1|^2 |\psi_1|^2 + |c_3|^2 |\psi_3|^2}_{\equiv f(x)} + \underbrace{2c_1 c_3 \psi_1 \psi_3 \cos \frac{E_3 - E_1}{\hbar} t}_{\equiv g(x)}$$

og med $\frac{E_3 - E_1}{\hbar} = (\frac{7}{2} - \frac{3}{2})\omega_0 = 2\omega_0$ blir dette

$$P(x,t) = f(x) + g(x) \cos 2\omega_0 t$$

Perioden, T , er gitt ved at $2\omega_0 T = 2\pi \Rightarrow T = \frac{\pi}{\omega_0}$

Klassisk vil oscillatoren, med egen(vinkel) frekvens ω_0 sprette tilbake fra den kullharde veggen ved $x=0$, og vil derfor bruke halv tiden pr.

"omløp" i forhold til den hele oscillatoren. ~~At~~

$$T_{kl} = \frac{1}{2} \frac{2\pi}{\omega_0} = \frac{\pi}{\omega_0} = T \quad \text{Fullt sammenkl.} \Leftrightarrow \text{QM i dette eksemplet.}$$

Oppgave 2

a Når to partikler ikke er til å skille fra hverandre (identiske) må sannsynlighetsfeltet $\mathcal{P}(1,2) = |\Psi(1,2)|^2$ være symmetrisk under ombyttet $1 \leftrightarrow 2$. (Ellers ville det jo være noe spesielt med "1" relativt "2"!)

$$\text{Generelt: } \Psi(2,1) = e^{i\gamma} \Psi(1,2)$$

Entydighet gir (unntatt i meget eksotiske spesialtilfeller)

$$\Psi(1,2) = e^{i\gamma} \Psi(2,1) = e^{2i\gamma} \Psi(1,2)$$

$$\Rightarrow \gamma = \begin{cases} 0 & \text{for relativistisk} \\ \pi & \text{QM} \end{cases} \quad \downarrow$$

$$\Rightarrow \begin{cases} \Psi(1,2) = \Psi(2,1) & \text{bosoner, heltallig spin} \\ \Psi(1,2) = -\Psi(2,1) & \text{fermioner, halv-tallig spin} \end{cases}$$

Bosoner: fotoner, fononer, ⁴He-atomer i grunntilst., π -mesoner.
Fermioner: elektroner, protoner, nøytroner, positroner, nøytrinoer, ...
³He-atomer i gr.tilst., ...

b To tilstander per spin, to spin \Rightarrow 4 spin-tilst. i 2-spin-systemet.

$$\chi(1,2) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\chi_{\uparrow}(1) \chi_{\downarrow}(2) - \chi_{\uparrow}(2) \chi_{\downarrow}(1)) \quad \begin{array}{l} \text{antikym.} \\ \text{spin} \\ \text{singlett} \end{array}$$

$$\chi(1,2) = \begin{cases} \chi_{\uparrow}(1) \chi_{\uparrow}(2) & \text{Symmetrisk} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} (\chi_{\uparrow}(1) \chi_{\downarrow}(2) + \chi_{\downarrow}(1) \chi_{\uparrow}(2)) & \text{spin} \\ \chi_{\downarrow}(1) \chi_{\downarrow}(2) & \text{Triplett} \end{cases}$$

Alle disse 4 tilstandene er egentilstander både til S^2 og S_{zop} .

c Elektroner er fermioner og må derfor ha antisymmetriske totaltilstander. Med rørdel $\phi(1,2)$ og spinndel $\chi(1,2)$ betyr dette at

eller

$$\psi_A(1,2) = \phi_S(1,2) \chi_A(1,2) \quad A: \text{antisym}$$

$$\psi_S(1,2) = \phi_A(1,2) \chi_S(1,2) \quad S: \text{sym}$$

Totalt 6 muligheter

$$\psi(1,2) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\chi_{\uparrow}(1)\chi_{\downarrow}(2) - \chi_{\downarrow}(1)\chi_{\uparrow}(2)) \begin{cases} \phi_1(1)\phi_1(2) & (1) \\ \frac{1}{\sqrt{2}} (\phi_1(1)\phi_2(2) + \phi_2(1)\phi_1(2)) & (2) \\ \phi_2(1)\phi_2(2) & (3) \end{cases}$$

$$\psi(1,2) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\phi_1(1)\phi_2(2) - \phi_2(1)\phi_1(2)) \begin{cases} \chi_{\uparrow}(1)\chi_{\uparrow}(2) & (4) \\ \frac{1}{\sqrt{2}} (\chi_{\uparrow}(1)\chi_{\downarrow}(2) + \chi_{\downarrow}(1)\chi_{\uparrow}(2)) & (5) \\ \chi_{\downarrow}(1)\chi_{\downarrow}(2) & (6) \end{cases}$$

Siden energien, uten spin-bane kopling og uten magnetfelt, utelukkende er knyttet til rørdelen må

- (1) ha lavest energi, uao. grunntilstanden
- (3) høyest energi, og må derfor være den hvis energi overstiger ioniseringsenergien.

d Utvalgsregler for dipolstråling: $\Delta l = \pm 1$ $\Delta m_l = 0, \pm 1$ $\Delta S = 0$, $\Delta m_s = 0$. Det nest siste kravet innebærer at dipolstråling ikke kan gi overgang mellom spin-triplett tilstander (orto-He) og spin-singlett tilstander (para-He). Den oppgitte tilstand hører til en spin-triplett og kan ikke falle ned til grunntilst. (spin-singlett) uansett Δl , i dipol-tilnærmsen.

Oppgave 3

a
$$E_b \left(\begin{smallmatrix} A \\ Z \end{smallmatrix} \right) = a_1 A - a_2 A^{2/3} - a_3 \frac{Z^2}{A^{1/3}} - a_4 \frac{\left(\frac{A}{2} - Z \right)^2}{A} + \epsilon_5$$

Bindingsenergien i denne drøpmodellen for kjernen er, iflg von Weizsäcker, sammensatt av

$a_1 A$, der $A = N + Z = \text{totalt } \# \text{ nukleoner}$, gir "fordampningsvarmen", a_1 , pr. nukleon, multiplisert med $\# \text{ nukleoner}$

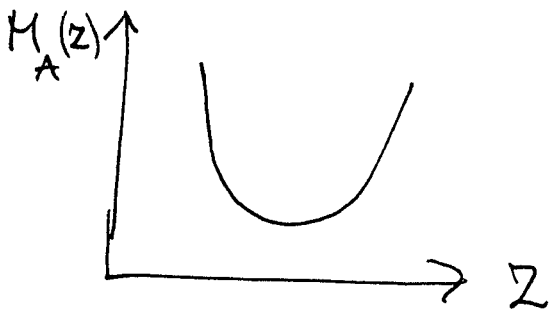
$-a_2 A^{2/3}$ korrigerer for at nukleonene i kjernens overflate ($\sim A^{2/3}$) har færre naboer enn de inni kjernen, og er derfor svakere bundet.

$-a_3 \frac{Z^2}{A^{1/3}}$ korrigerer for Coulomb-frerstøtningen mellom protonene. $\# \text{ par} = \frac{1}{2} Z(Z-1) \approx \frac{1}{2} Z^2$, og midlere avstand skaleres som $R \sim A^{1/3}$.

$-a_4 \frac{\left(\frac{A}{2} - Z \right)^2}{A} = -\frac{a_4}{4A} (N-Z)^2$ er en konsekvens av Fermi-statistikk. Siden nivåene blir fylt medentfer i de to fermion-systemene separat, er det energetisk fordelaktig å fylle begge like høyt. Avvik for $N \neq Z$ gir negativ korrelasjon til bindingsenergien.

ϵ_5 : Par-effekter.

b Med $A = \text{odde tall} = \text{konst}$ har massen som funksjon av Z formen (bare a_3 & a_4 -leddene bidrar)



$$M_A = N M_n + Z M_p - E_b \left(\begin{smallmatrix} A \\ Z \end{smallmatrix} \right) / c^2$$

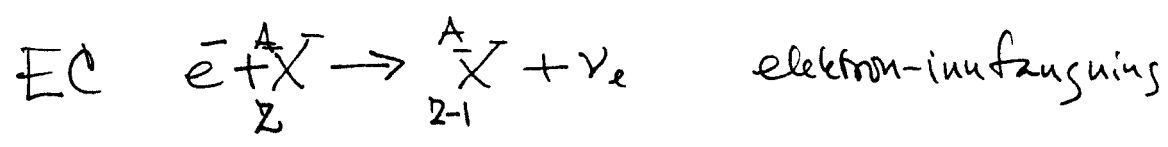
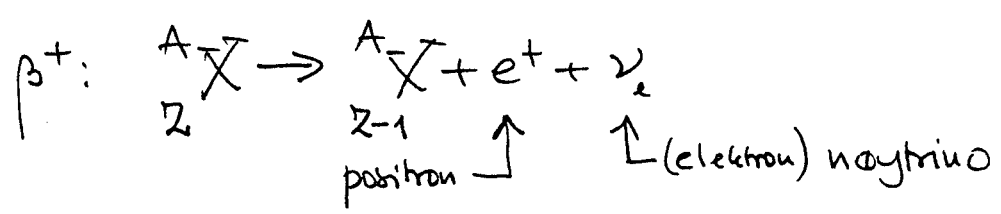
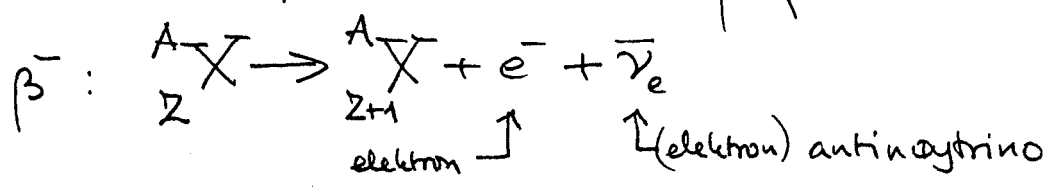
M_n : nøytronmasse

M_p : protonmasse

↑ Def. bindingsenergi.

$$\begin{aligned}
 M_A(Z+1) - M_A(Z) &= (N-1)M_n + (Z+1)M_p - NM_n - ZM_p - \frac{\Delta E_b}{c^2} \\
 &= M_p - M_n - \frac{1}{c^2} \left[-\frac{a_3}{A^{1/3}} \{ (Z+1)^2 - Z^2 \} - \frac{a_4}{A} \left\{ \left(\frac{A}{2} - (Z+1) \right)^2 - \left(\frac{A}{2} - Z \right)^2 \right\} \right] \\
 &= M_p - M_n + \frac{1}{c^2} \left[\frac{a_3}{A^{1/3}} (2Z+1) - \frac{a_4}{A} (A - 2Z - 1) \right] \text{ ged.}
 \end{aligned}$$

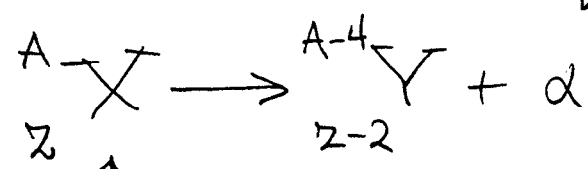
c. Alle de 3 prosessene her er β -prosesser



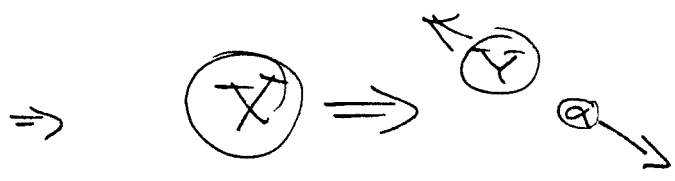
I EC-prosessen er det (med overveldende sannsynlighet) et K-elektron (innerste elektron-skall) som innfanges av kjernen. Prosessen etterfølges av γ -stråling pga et den "ledige" lavenergi-tilstanden i K-skallet fylles av et elektron ved overgang (dipol) fra et høyere nivå.

d. α -desintegrasjon:

\swarrow ^4He -kjernen



i ro før støtet
pr. antall



Energibevarelse:

$$M_X c^2 = M_Y c^2 + M_\alpha c^2 + K_Y + K_\alpha$$

$\uparrow \uparrow$ kinetisk energi

Impulsbevarelse

↑ Ikke-relativistisk tilnærme

$$0 = \vec{p}_Y + \vec{p}_\alpha \quad \Rightarrow \quad K_Y = \frac{p_Y^2}{2M_Y} = \frac{p_\alpha^2}{2M_Y} = \frac{M_\alpha}{M_Y} K_\alpha$$

Altst

$$K_\alpha \left(1 + \frac{M_\alpha}{M_Y}\right) = (M_X - M_Y - M_\alpha) c^2$$

Når massene er gitt, følger det derfor av energi- og impulsbevarelse at K_α får én bestemt verdi.

Den konklusjonen er ikke en tilnærme bygd på ikke-relativistisk regning. Relativistisk har en

$$M_X c^2 = \underbrace{\sqrt{M_Y^2 c^4 + p_Y^2 c^2}}_{\text{energi bev.}} + \underbrace{\sqrt{M_\alpha^2 c^4 + p_\alpha^2 c^2}}_{\text{imp. bev}} = \sqrt{M_Y^2 c^4 + p_\alpha^2 c^2} + \sqrt{M_\alpha^2 c^4 + p_\alpha^2 c^2}$$

Igjen: 1 likning med 1 ukjent $\Rightarrow p_\alpha$ bestemt $\Rightarrow E_\alpha$ bestemt }

I en β -prosess emitteres to partikler (feks e^- og $\bar{\nu}_e$) i tillegg til datterkjernen. Dermed vil den ene elstr partikkelen innføre 4 nye variabler (feks. K_ν og \vec{p}_ν) og selv om $m_\nu = 0$ slik at $E_\nu = p_\nu c$ vil dette gi 3 elstr ukjente uten elstr likninger. Energien fordeles på stokastisk vis mellom γ , e^- og $\bar{\nu}_e$, og energispektrat til de emiterte elektronene blir dermed kontinuerlig (opp til en maksimal energi som svarer til at elektronet tar hele kernen.)