NORGES TEKNISK-NATURVITENSKAPELIGE UNIVERSITET
INSTITUTT FOR FYSIKK

Faglig kontakt under eksamen:
P. C. Hemmer
Tel. 93648

# EKSAMEN I FAG 74326 KVANTEMEKANIKK 2

Fredag 30. august 1996
kl. 0900-1400

Tillatte hjelpemidler: Rottmann: Mathematische Formelsammlung
Rottmann: Matematisk formelsamling
Barnett and Cronin: Mathematical Formulae
Godkjent kalkulator

Endel uttrykk, formler og konstanter er gitt i eget vedlegg.

## Oppgave 1

a) Utled i første ordens WKB-approksimasjon uttrykk for de to uavhengige løsningene for bølgefunksjonen $\psi(x)$ av den stasjonære Schrödingerlikning i én romdimensjon,

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) + V(x)\psi(x) = E\,\psi(x).$$

b) For et potensial $V(x)$ som varierer kontinuerlig gir første ordens WKB-approksimasjon følgende betingelse for den $n$te energiegenverdien $E_n$ ($n = 1, 2, ..$):

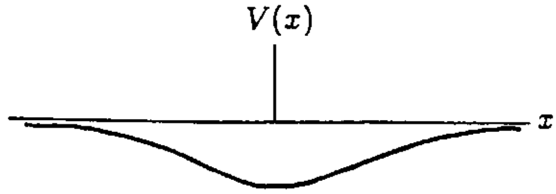
$$2\int \sqrt{2m[E_n - V(x)]}\,dx = (n - \tfrac{1}{2})h,$$

der $h$ er Plancks konstant, og der det integreres over det området der integranden er reell.

Skissér kort uten detaljer framgangsmåten som leder til ovenstående kvantiseringsbetingelse.

( Uten kom. innslag )

c)




En partikkel med masse $m$ som befinner seg i det éndimensjonale potensialet

$$V(x) = -V_0\, e^{-x^2/a^2}$$

har bare én eneste bunden energiegentilstand. Dette krever at partikkelmassen $m$ er mindre enn en viss øvre skranke $m_{max}(1)$. Bestem i WKB-approksimasjonen $m_{max}(1)$ (uttrykt bl.a. ved potensialets styrke $V_0$ og utstrekning $a$).

Dersom partikkelen hadde hatt $n$ bundne tilstander ville den tilsvarende begrensning $m_{max}(n)$ for massen vært større. Bestem forholdet

$$\frac{m_{max}(n)}{m_{max}(1)}.$$

## Oppgave 2

I Thomas-Fermi-approksimasjonen beskrives et mangeelektronsystem ved to størrelser: antallstettheten $n(\vec{r})$ for elektronene, og den effektive potensielle energi $V(\vec{r})$ for et elektron på stedet $\vec{r}$.

a) Gjør greie for de antagelser som Thomas-Fermi metoden er basert på, og skriv ned de to grunnlikningene som alle anvendelser av metoden bygger på.

b) Et atom har kjerneladning $Ze$ og befinner seg i grunntilstanden. Bruk Thomas-Fermi-metoden til å utlede følgende ikke-lineære differensiallikning

$$\frac{d^2\Phi}{dz^2} = \frac{\Phi^{\frac{3}{2}}}{\sqrt{z}} \tag{1}$$

for forholdet

$$\Phi = -\frac{V(r)}{Ze^2/4\pi\varepsilon_0 r}$$

mellom det effektive potensial $V(r)$ og Coulomb-potensialet fra kjernen alene. Her er

$$z = 8(6\pi)^{-\frac{2}{3}} Z^{\frac{1}{3}}\, r/a_0$$

et dimensjonsløst mål for avstanden $r$ til kjernen, der $a_0$ er Bohrradien.

Hvilke grensebetingelser må differensiallikningen (1) suppleres med i dette tilfellet for å få den relevante løsning?

c) Vis at i Thomas-Fermi-approksimasjonen er antallstettheten $n(r)$ av atomets elektroner gitt ved potensialet ved følgende sammenheng:

$$n(r) = \frac{32Z^2}{9\pi^3 a_0^3}\left[\frac{\Phi(z)}{z}\right]^{\frac{3}{2}}.$$

d) For store avstander faller den relevante løsning av (1) av som en potens,

$$\Phi(z) \simeq a z^{-b}.$$

Bestem potensen $b$.

Antallstettheten $n(r)$ i Thomas-Fermi-approksimasjonen faller også mot null som en potens,

$$n(r) \propto r^{-c},$$

for store avstander. Bestem potensen $c$.

Med økende avstand $r$ faller ikke den *eksakte* elektrontetthet mot null som en potens, men eksponensielt med $r$. Forklar kort hvorfor.

e) La oss her definere atomradien $R_{0.99}$ som radien av en kule (med kjernen i sentrum) som i middel inneholder 99% av elektronene. I Thomas-Fermi-approksimasjonen er $R_{0.99}$ proporsjonal med en potens av atomnummeret,

$$R_{0.99} \propto Z^d.$$

Bestem potensen $d$?

## Oppgave 3

a) For et elektron i en eksitert atomær tilstand $|i\rangle$ (energi $E_i$) vil i dominerende orden, og i elektrisk-dipol-tilnærmelsen, den spontane overgangssannsynlighet pr. tidsenhet til en annen atomær tilstand $|f\rangle$ (energi $E_f$) være gitt som

$$w_{i\to f}^{sp} = \frac{4\alpha\omega_{if}^3}{3c^2}|\langle f|\vec{r}|i\rangle|^2,$$

der $\alpha$ er finstrukturkonstanten og $\hbar\omega_{if} = E_i - E_f$.

Hvilken vekselvirkning mellom strålingsfelt og ladede partikler ligger til grunn for utledningen av ovenstående overgangssannsynlighet? Hva består elektrisk-dipol-tilnærmelsen i? Hva er en forbudt overgang?

b) Et elektron befinner seg i potensialet

$$V(\vec{r}) = \begin{cases} \frac{1}{2}m\omega_0^2(x^2+y^2) & \text{for} \quad 0 < z < L \\ \infty & \text{ellers.} \end{cases}$$

(Dette har vært brukt som modellpotensial for såkalte kvantebrønner i halvledere.)

Elektronets energiegentilstander er av produktform,

$$\Psi_{n_x,n_y,n_z}(\vec{r}) = \psi_{n_x}(x)\varphi_{n_y}(y)\chi_{n_z}(z),$$

der $n_i$ er heltall: 0(lavest energi), 1(nestlaveste energi), osv. Tilstandene betegnes kort som $(n_x, n_y, n_z)$.

Hvilke eksiterte tilstander $(n_x, n_y, n_z)$ har tillatte overganger direkte til grunntilstanden (0,0,0)?

# Vedlegg: Formler, uttrykk og konstanter

(Noe av dette kan du få bruk for)

## Ideell fermigass

I grunntilstanden er den maksimale kinetiske energi for en partikkel i en ideell gass av spinn-$\frac{1}{2}$ fermioner lik

$$\epsilon_F = \frac{\hbar^2}{2m}(3\pi^2 n)^{\frac{2}{3}},$$

der $n = N/V$ er antallstettheten og $m$ partikkelmassen.

## Finstrukturkonstanten

$$\alpha = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0\hbar c} \simeq \frac{1}{137.05}$$

## Laplaceoperatoren i kulekoordinater

I tre dimensjoner er $\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} +$ vinkelderiverte.

## Balmer-formelen

De diskrete egenverdiene i Coulombpotensialet $V(r) = -e^2/4\pi\varepsilon r$ er

$$E_n = -\frac{m}{2\hbar^2}\left(\frac{e^2}{4\pi\varepsilon}\right)^2 \frac{1}{n^2}.$$

## Bohr-radien

$$a_0 = \frac{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}{me^2} = 0.53\text{Å}.$$

## Harmonisk oscillator-egenfunksjoner

Egenfunksjonene i posisjonsrommet for en partikkel med masse $m$ i det éndimensjonale potensialet $V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$ er, for de to laveste energinivåene og med $\hat{x} = x\sqrt{m\omega/\hbar}$

$$\langle x|0\rangle = \psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\hat{x}^2/2}$$

$$\langle x|1\rangle = \psi_1(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \sqrt{2}\,\hat{x}\, e^{-\hat{x}^2/2}.$$

## Integraler

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{\cosh^2 x} = 2$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2}\, dx = \sqrt{\pi}$$

$$\int \sin(Ax)\,\sin(Bx)\,dx = \frac{\sin(Ax - Bx)}{2(A-B)} - \frac{\sin(Ax + Bx)}{2(A+B)}$$