Norges teknisk-naturvitenskapelige universitet
Institutt for fysikk

EKSAMEN I: MNFFY104 - KVANTEFYSIKK OG STATISTISK FYSIKK

DATO: TIRSDAG 30. MAI 2000 TID: 09.00-15.00

Antall vekttall:	5	Tillatte hjelpemidler:
Antall sider:	5	Matematiske tabeller,
Sensurdato:	26. Juni 2000	kalkulator

Oppgave 1

En partikkel med masse m befinner seg i et éndimensjonalt potensialfelt $U(x)$. Potensialfunksjonen $U(x)$ er *symmetrisk i x*, og det gjelder videre at

$$U(x) \to 0 \quad \textit{når} \;\; x \to \infty. \tag{1.1}$$

Den tidsuavhengige Schrödingerligningen for systemet har formen

$$[H]\,\psi(x) = E\psi(x), \tag{1.2}$$

der

$$[H] = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + U(x) \tag{1.3}$$

er Hamiltonoperatoren og E står for energiegenverdien hørende til egenfunksjonen $\psi(x)$.
I en bestemt stasjonær tilstand er bølgefunksjonen gitt på følgende måte:

$$\psi(x) = N\,\frac{1}{(x^2+a^2)^{3/2}}, \tag{1.4}$$

der a er en fast (reell) konstant og N en normeringskonstant.

a. Bestem potensialfunksjonen $U(x)$ og den tilhørende energiegenverdien E.

b. Angi nullpunkter og ekstremalpunkter for funksjonen $U(x)$ og skissér denne. Bestem de såkalte *klassiske vendepunktene* for en partikkel med energien E funnet i pkt. **a.** , og merk av disse punktene på skissen av $U(x)$.

c. Når vi som her har en potensialfunksjon $U(x)$ som er symmetrisk i x, gjelder at løsningene $\psi(x)$ av Schrödingerligningen i (1.2) kan deles opp i to hovedklasser. Beskriv kort hva som kjennetegner disse to klassene.
I pkt. **a.** har vi bestemt potensialet $U(x)$ og energiegenverdien E svarende til egenfunksjonen $\psi(x)$ gitt i (1.4). Er det noen grunn til å tro at denne løsningen av Schrödingerligningen svarer til *grunntilstanden* for systemet vi ser på, og i tilfelle hvorfor?

d. Bestem, med minst mulig regning/beregninger, forventningsverdiene $\langle x \rangle$ og $\langle p_x \rangle$ *i* tilstanden $\psi(x)$ gitt i (1.4).

Oppgave 2

For et system bestående av totalt N partikler gjelder at antall partikler med *fart* mellom v og $(v+dv)$ $[v=\sqrt{v_x^2+v_y^2+v_z^2}]$ er gitt ved fordelingsfunksjonen

$$n(v)dv=C\left[e^{-\frac{v}{v_0}}-e^{-\frac{3}{2}\left(\frac{v}{v_0}\right)}\right]dv, \tag{2.1}$$

der v_0 er en fast konstant og C en normeringskonstant.

a. Bestem konstanten C uttrykt ved N og v_0.

b. Finn et uttrykk for *sannsynligheten* $P(v)\,dv$ for å finne en partikkel med fart v i intervallet $(v,\ v+dv)$, og bestem deretter *den mest sannsynlige farten*, v_{mp} (*m*ost *p*robable).
Vis at maksimalverdien P_M av funksjonen $P(v)$ er gitt som

$$P_M=\frac{4}{9v_0}. \tag{2.2}$$

c. Beregn den midlere farten $\bar{v}$ og *rms*-farten $v_{rms}=\sqrt{\overline{v^2}}$.

d. La *Prob* $(v \geq V)$ stå for sannsynligheten for å finne en partikkel med fart $v \geq V$, der V er en vilkårlig men fast konstant.
Finn denne sannsynligheten, og påvis deretter at

$$Prob\ (v \geq v_{mp})=\frac{20}{27}\approx 0.74. \tag{2.3}$$

Hva blir *Prob* $(v \geq 0)$?

Oppgitt: $\displaystyle\int_0^\infty x^n e^{-ax}dx=\frac{n!}{a^{n+1}}$ $\quad (a>0)$

Oppgave 3

I denne oppgaven skal vi se på energinivåer og spektra for hydrogenlike atomer/ioner, der *ett* elektron med masse m og ladning $(-e)$ er bundet til en tung kjerne med ladning $+Ze$. Elektronets potensielle energi er gitt ved Coulomb-potensialet:

$$U(r) = -\frac{CZ}{r}; \quad C = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}. \tag{3.1}$$

Den tidsuavhengige Schrödingerligningen for systemet har standardformen

$$[H_0]\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}), \tag{3.2}$$

der

$$[H_0] \equiv -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U(r) \tag{3.3}$$

er Hamiltonoperatoren og E står for energiegenverdien hørende til bølgefunksjonen (egenfunksjonen) $\psi(\vec{r})$. For et sentralfelt kan som kjent Schrödingerligningen i (3.2) løses ved å innføre kulekoordinater (r,θ,φ) og bruke metoden med separasjon av de variable.

For Coulombpotensialet gjelder spesielt at lign. (3.2) bare har akseptable løsninger dersom energien E antar bestemte, diskrete verdier, nemlig

$$E = E_n = -E_R\frac{Z^2}{n^2}, \quad n = 1,2,3..... \tag{3.4}$$

der n kalles *hovedkvantetallet* og E_R (kalt Rydbergenergien) er gitt som

$$E_R = \frac{mC^2}{2\hbar^2} = 13.6\,eV. \tag{3.5}$$

De tilhørende egenfunksjonene er karakterisert ved kvantetallene (n,ℓ,m_ℓ) og kan angis som

$$\psi_{n,\ell,m_\ell}(r,\theta,\varphi) = R_{n,\ell}(r)\,Y_\ell^{m_\ell}(\theta,\varphi), \tag{3.6}$$

der $R_{n,\ell}(r)$ er kjent som radialfunksjonen og $Y_\ell^{m_\ell}(\theta,\varphi)$ er egenfunksjoner for dreieimpulsoperatorene $[L^2]$ og $[L_z]$ slik at

$$[L^2]Y_\ell^{m_\ell} = \ell(\ell+1)\hbar^2 Y_\ell^{m_\ell}, \qquad [L_z]Y_\ell^{m_\ell} = m_\ell\hbar Y_\ell^{m_\ell}. \tag{3.7}$$

Med dette følger at Schrödingerligningen i (3.2) kan spesifiseres mer eksplisitt som

$$[H_0]\psi_{n,\ell,m_\ell}(r,\theta,\varphi) = E_n\psi_{n,\ell,m_\ell}(r,\theta,\varphi). \tag{3.8}$$

a. Hvilke verdier kan kvantetallet ℓ anta for et gitt hovedkvantetall n?
Hvilke verdier kan kvantetallet m_ℓ ha?
Hvor mange forskjellige (uavhengige) egenfunksjoner av formen angitt i (3.6) har vi for en gitt energiegenverdi E_n bestemt ved kvantetallet n?

I en såkalt optisk overgang/strålingsovergang vil et eksitert elektron med energi E_{n_i} (*i*nitial) gå til et lavere energinivå E_{n_f} (*f*inal) og sende ut lys. Gi en kort forklaring og begrunnelse for relasjonen

$$\hbar\omega_{n_i,n_f} = E_{n_i} - E_{n_f} \qquad (n_i > n_f), \tag{3.9}$$

og finn den numeriske verdien av $\omega_{3,2}$ *for et hydrogenatom.* Hvilken bølgelengde λ (i enheter Ångstrøm) svarer dette til?

* * * * * * * * * * * *

Klassisk sett vil elektronbevegelsen i atomet generere et magnetfelt som gir atomet (det bundne systemet) et magnetisk dipolmoment

$$\vec{\mu}_L = -\frac{e}{2m}\vec{L} \quad , \tag{3.10}$$

der $\vec{L}$ er dreieimpulsen til elektronet. Plasseres atomet i et (svakt) *ytre magnetfelt* $\vec{B}$, der *z*-aksen velges langs $\vec{B}$ slik at $\vec{B} = B\vec{e}_z$, får atomet en magnetisk potensiell energi

$$U_{mag} = -\vec{\mu}_L \cdot \vec{B} = \frac{eB}{2m}L_z = \omega_L L_z, \tag{3.11}$$

der $\omega_L \equiv eB/2m$ er kjent som Larmorfrekvensen.

NB! *I denne oppgaven ser vi bort fra det faktum at elektronet også har en indre dreieimpuls/ et spinn $\vec{S}$, og et tilhørende magnetisk dipolmoment $\vec{\mu}_S$.*

b. Skriv opp den totale Hamiltonoperatoren $[H]$ for systemet når atomet plasseres i et ytre magnetfelt, påvis at funksjonene ψ_{n,ℓ,m_ℓ} angitt (3.6) er egenfunksjoner for denne operatoren, og angi de tilhørende energiegenverdiene.
Forklar kort hvilke kvantetall som bestemmer de tillatte energiene, og videre hvorfor alle energinivåene gitt ved (3.4), *bortsett fra grunntilstanden E_1,* vil splittes opp i flere nærliggende nivåer.
Angi til slutt eksplisitt hvordan første eksiterte nivå (E_2) og andre eksiterte nivå (E_3) splittes opp i et magnetfelt, og lag en skisse/tegning som viser energinivåene E_2 *og* E_3 samt oppsplittingen av disse.

* * * * * * * * * * *

Uten ytre magnetfelt består som kjent emisjonsspekteret for hydrogen av bestemte serier med spektrallinjer; den laveste frekvensen i den såkalte Balmerserien for hydrogen er frekvensen $\omega_{3,2}$ bestemt i pkt. **a.**

c. Oppsplittingen av energinivåene E_2 og E_3 i et magnetfelt fører også til at spektrallinjen med frekvens $\omega_{3,2}$ splittes opp i flere linjer med nærliggende frekvenser.
Hvilke frekvenser kan vi ha, *i tillegg til* $\omega_{3,2}$, om vi antar at *alle* de aktuelle energiovergangene er tillatte, og hva er forskjellen i frekvens mellom to nabolinjer?

d. Strålingsovergangene vi ser på er i virkeligheten underlagt såkalte *utvalgsregler* (*"selection rules"*):

$$\Delta\ell = \pm 1 \ ; \quad \Delta m_\ell = -1, 0, 1. \tag{3.12}$$

Beskriv kort hvordan disse reglene skal tolkes og hva som gir opphav til (er bakgrunnen for) disse. Hvilke av frekvensene funnet i pkt. **c.** må *utelukkes* dersom reglene i (3.12) gjelder, og hvor mange linjer/frekvenser sitter vi igjen med?

{*Oppsplittingen vi her ser på er kjent som normal Zeeman-effekt*}.

Oppgitt:

$$\sum_{k=1}^{n} k = \frac{n(n+1)}{2}.$$

$$\hbar = 6.58 \cdot 10^{-16} \, (eV) s \ ; \quad c = 3.00 \cdot 10^{8} \, m/s.$$