

LØSNINGSFORSLAG

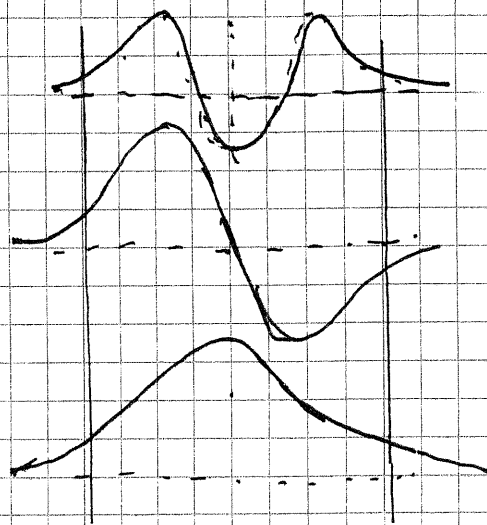
OPPGAVE 1

a) b) Bølgefunksjonen i 1(a) er en løsning for potensialet nedest på figuren. En systematisk måte å se på mulige bølgefunksjoner er å se på de to grensetilfellene at

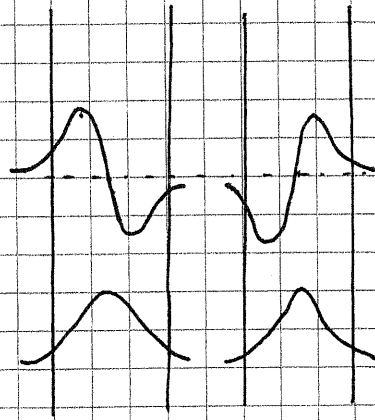
i) barrieren i midten går mot null

ii) barrieren i midten blir stor

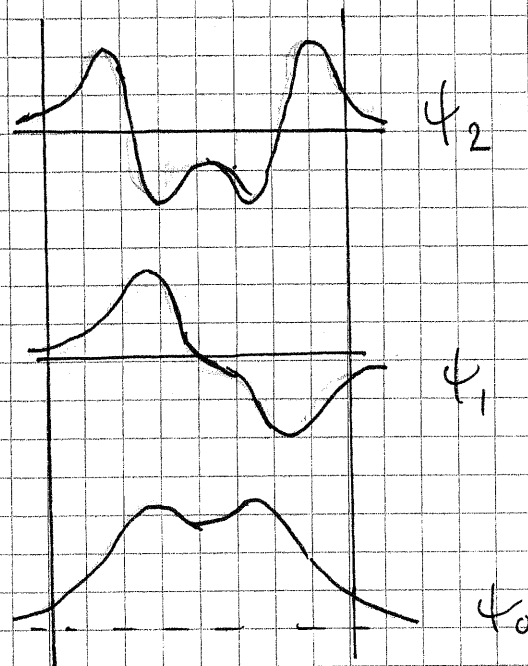
i) De tre laveste energitilstandene tilsvarende bølgefunksjonene



ii)



Symmetriske og antisymmetriske kombinationer af disse for en moderat barriere i midten gir følgende bølgefunktioner for de tre laveste tilstandene



Dette er

$$\begin{aligned}\Delta E_0 &= \int_{-a/2}^{a/2} V_0 \cos(\pi x/a) \cdot \cos^2 \pi x/a \, dx \bigg/ \int_{-a/2}^{a/2} \cos^2 \pi x/a \, dx \\ &= V_0 \int_{-\pi/2}^{\pi/2} \cos^3 \xi \, d\xi \bigg/ \int_{-\pi/2}^{\pi/2} \cos^2 \xi \, d\xi \\ &= V_0 \cdot \frac{8}{3\pi}\end{aligned}$$

Grundtilstanden:

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\pi^2}{a^2} + V_0 \frac{8}{3\pi}$$

Laveste eksiterte tilstand, E_1

$$\begin{aligned}\Delta E_1 &= \int_{-a/2}^{a/2} V_0 \cos \pi x/a \cdot \sin^2 2\pi x/a \, dx \bigg/ \int_{-a/2}^{a/2} \sin^2 2\pi x/a \, dx \\ &= V_0 \int_{-\pi/2}^{\pi/2} \cos \xi \cdot \sin^2 2\xi \, d\xi \bigg/ \int_{-\pi/2}^{\pi/2} \sin^2 2\xi \, d\xi \\ &= 4V_0 \int_{-\pi/2}^{\pi/2} (\cos^3 \xi - \cos^5 \xi) \, d\xi \bigg/ \int_{-\pi/2}^{\pi/2} \sin^2 2\xi \, d\xi \\ &= V_0 \frac{32}{45\pi}\end{aligned}$$

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{4\pi^2}{a^2} + V_0 \frac{32}{45\pi}$$

c) Schrödingerligningen: for $V = \text{konst} = 0$
inde i boksen.

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi$$

Denne har to typer løsninger; symmetriske og antisymmetriske. Grænsebetingelsen er $\psi = 0$ for $x = \pm \frac{a}{2}$.

$$\text{Dette giver } \psi_s = A \cos(2n+1)\pi x/a$$

$$\psi_a = B \cdot \sin 2n \cdot \pi x/a$$

Laveste tilstand:

$$\psi_0 = A \cdot \cos \pi x/a$$

$$E_0 = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\pi^2}{a^2}$$

Nest laveste:

$$\psi_1 = B \cdot \sin 2\pi x/a$$

$$E_1 = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{4\pi^2}{a^2}$$

Som en tilnærmet energi kan vi beregne:

$$E = \langle \psi_0 | H_0 + \Delta H | \psi_0 \rangle$$

$$\text{der } H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2}, \quad \Delta H = V.$$

Oppgave 2.

a)

Ut fra symmetriargumenter ser vi med en gang at $\langle x \rangle = 0$; $\langle p \rangle = 0$

Sannsynlighetsfordelingen $P = |\Psi|^2$ er symmetrisk, x og p er antisymmetriske. Vi behøver derfor bare beregne $\langle x^2 \rangle$ og $\langle p^2 \rangle$

Vi starter med grunntilstanden

$$\Psi_0 = \left(\frac{m\omega_0}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega_0^2 x^2}{2\hbar}}$$

$$\langle x^2 \rangle = 2 \int_0^{\infty} x^2 \left(\frac{m\omega_0}{\pi\hbar}\right)^{1/2} e^{-\frac{m\omega_0^2 x^2}{\hbar}} dx$$

$$= 2 \left(\frac{m\omega_0}{\pi\hbar}\right)^{1/2} \frac{1}{2} \left(\frac{m\omega_0^2}{\hbar}\right)^{-3/2} \Gamma\left(\frac{3}{2}\right)$$

$$= \frac{1}{2} \frac{\hbar}{m\omega_0}$$

Videre får vi:

$$\langle p^2 \rangle = -2 \left(\frac{m\omega_0}{\pi\hbar}\right)^{1/2} \int_0^{\infty} e^{-\frac{1}{2}ax^2} \frac{d^2}{dx^2} e^{-\frac{1}{2}ax^2} dx \quad ; a = \frac{m\omega_0}{\hbar}$$

$$= -\frac{2\hbar^2}{\hbar} \left(\frac{m\omega_0}{\pi\hbar}\right)^{1/2} \int_0^{\infty} e^{-ax^2} (-a + a^2 x^2) dx$$

$$\begin{aligned}
\langle p^2 \rangle &= 2\hbar^2 \left(\frac{m\omega_0}{\pi\hbar} \right)^{1/2} \left(a \cdot \frac{1}{2} a^{-1/2} \Gamma\left(\frac{1}{2}\right) - a^2 \frac{1}{2} a^{-3/2} \Gamma\left(\frac{3}{2}\right) \right) \\
&= 2\hbar^2 \left(\frac{m\omega_0}{\pi\hbar} \right)^{1/2} \left(\frac{1}{2} \sqrt{a} \sqrt{\pi} - \frac{1}{4} \sqrt{a} \sqrt{\pi} \right) \\
&= 2\hbar^2 \left(\frac{m\omega_0}{\pi\hbar} \right)^{1/2} \frac{1}{4} \sqrt{\pi} \sqrt{\frac{m\omega_0}{\hbar}} \\
&= \frac{\hbar\omega_0}{4} \cdot 2m.
\end{aligned}$$

b) Erwartungswert von $\langle V \rangle$ bei

$$n=0$$

$$\begin{aligned}
\langle V \rangle &= \frac{1}{2} kx^2 = \frac{1}{2} \cdot k \cdot \frac{1}{2} \frac{\hbar}{m\omega_0} = \frac{1}{4} \hbar \frac{\omega_0^2}{\omega_0} \\
&= \frac{1}{4} \hbar \omega_0 \\
&= \frac{1}{2} E_0
\end{aligned}$$

Erwartungswert von $\langle T \rangle$

$$\langle T \rangle = \frac{\langle p^2 \rangle}{2m} =$$

$$n=0$$

$$\langle T \rangle = \frac{\hbar\omega_0}{4} \cdot \frac{2m}{2m} = \frac{\hbar\omega_0}{4} = \frac{1}{2} E_0$$

$$c) \quad \Delta x \cdot \Delta p = \sqrt{(\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2)} (\langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2)$$

$$\langle x \rangle = 0, \quad \langle p \rangle = 0$$

$$\Delta x \Delta p = \sqrt{\langle x^2 \rangle \langle p^2 \rangle}$$
$$= \sqrt{\frac{1}{2}}$$

$$\frac{1}{2} k \langle x^2 \rangle = \frac{E_n}{2} \Rightarrow \langle x^2 \rangle = \frac{E_n}{k}$$

$$\frac{\langle p^2 \rangle}{2m} = \frac{E_n}{2} = \langle p^2 \rangle = E_n \cdot m$$

$$(\Delta x \Delta p)^2 = E_n^2 \cdot \frac{m}{k} = \frac{1}{k^2} \omega_0^2 \cdot \frac{m}{k} \left(n + \frac{1}{2}\right)^2$$
$$= \frac{1}{k^2} \left(n + \frac{1}{2}\right)^2$$

$$\Delta x \Delta p = \frac{1}{k} \left(n + \frac{1}{2}\right)$$

Oppgave 3.

a) Se lærebok

Energien til en dipol (magnetisk) i et ytre felt kan skrives som

$$V_M = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}$$

Krafta i z-retningen er da gitt som

$$\vec{F} = -\nabla V$$

$$\Rightarrow F_z = -\frac{\partial}{\partial z}(\mu_z B_z) = \mu_z \frac{\partial B_z}{\partial z}$$

Nå er $\langle \mu_z \rangle = -g_s \mu_B m_s$, slik at krafta kan skrives som

$$\vec{F}_z = -\frac{\partial B_z}{\partial z} \mu_B g_s m_s.$$

Hastigheten til et hydrogenatom som kommer ut fra oven kan beregnes som

$$\frac{1}{2} m v_x^2 = 2kT$$

$$v_x = \sqrt{\frac{4kT}{m}}$$

Traverstiden er da gitt av

$$t = \frac{L_x}{v_x} = L_x \sqrt{\frac{m}{4kT}}$$

Utslaget i z-retningen for et spinn opp atom:

$$Z = \frac{1}{2} a_z t^2 = \frac{1}{2} \frac{F_z}{M} \cdot t^2 = \frac{1}{2} \frac{F_z}{M} \cdot \frac{L_x^2 M}{4kT}$$

$$= - \frac{\frac{\partial B_z}{\partial z} \mu_B \cdot g_M L_x^2}{8kT}$$

$$= - \frac{10 \cdot 0.927 \cdot 10^{-23} \cdot 2 \cdot \frac{1}{2} \cdot 1}{8 \cdot 1.38 \cdot 10^{-23}} = - 2 \cdot 10^{-3} \text{ m}$$

og tilsvarende for spin ned. Dette gir splittingsen: 4.2 mm.

c)

c) Hydrogenatomet har $n=2$, $l=1$
 Det betyr at vi kan ha tilstandene

$$P_{1/2} \quad \text{og} \quad P_{3/2}$$

Før et svakt magnetfelt er l et godt kvantetall. I 2 $P_{3/2}$ tilstander er

$$g = 1 + \frac{\frac{3}{2} \cdot \frac{5}{2} - 2 + \frac{3}{4}}{\frac{15}{2}} = \frac{4}{3}$$

$$\text{og} \quad \langle V_M \rangle = \frac{4}{3} \mu_B \cdot B \begin{bmatrix} 3/2 \\ 1/2 \\ -1/2 \\ -3/2 \end{bmatrix}$$

Slik at total splittning blir $\Delta V_M = 4 \mu_B \cdot B$.

Denne er større enn den tilsvarende splittning i 2 $P_{1/2}$ tilstander.

I et sterkt magnet felt

$$\langle V_M \rangle = \mu_B \cdot B (m_l + 2m_s), \quad m_l = \pm 1, 0, \quad m_s = \pm 1/2$$

Det fører igjen til at total splittning er

$$\Delta V_M = \mu_B \cdot B ((1 + 2 \cdot 1/2) - (-1 - 2 \cdot 1/2)) = 4 \mu_B \cdot B$$

Spin bane koblingen er gitt som

$$\langle V_{SL} \rangle = \frac{Z^4 \alpha^2}{n^3} \cdot E_0 \frac{j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)}{l(l+1)(2l+1)}$$

For $2P_{3/2}$ tilstanden er $j = l + 1/2 = 3/2$

$Z = 1$, $n = 2$, slik at

$$\langle V_{SL} \rangle = \frac{\alpha^2}{n^3} E_0 \cdot \frac{\frac{3}{2} \cdot \frac{5}{2} - 2 - \frac{3}{4}}{1 \cdot 2 \cdot 3} = \frac{\alpha^2}{n^3} E_0 \cdot \frac{1}{6}$$

Dette setter like Zeeman splittungen

$$\frac{\alpha^2}{n^3} E_0 \cdot \frac{1}{6} = 4 \mu_B B$$

$$\Rightarrow B = \frac{\alpha^2}{n^3} \frac{13.6}{6} \frac{1}{4 \mu_B} = \frac{1}{(137)^2} \cdot \frac{1}{8} \cdot \frac{13.6 \cdot 1.6 \cdot 10^{-19}}{6 \cdot 4 \cdot 0.93 \cdot 10^{-23}}$$

$$= 0.065 \text{ Tesla}$$

Oppgave 4.

a) Rotasjonsenergien er gitt av

$$E_J = \frac{\hbar^2}{2I} J(J+1)$$

$$\Delta E_2 = \frac{\hbar^2}{2I} ((J+2)(J+3) - (J+1)(J+2))$$

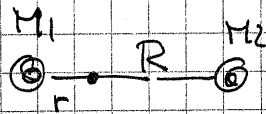
$$= \frac{\hbar^2}{2I} (J+2) \cdot 2$$

$$\Delta E_1 = \frac{\hbar^2}{2I} ((J+1)(J+2) - J(J+1))$$

$$= \frac{\hbar^2}{2I} (J+1) \cdot 2$$

$$\delta \Delta E = \Delta E_1 - \Delta E_2 = \frac{\hbar^2}{I}$$

Vi må nå beregne I .



Tregghetsmomentet for en slik rotator er

$$I = \mu R^2 = \frac{M_1 M_2}{M_1 + M_2} R^2$$

Detta følger av : $r = \frac{M_2}{M_1 + M_2} R$

$$I = M_1 \left(\frac{M_2}{M_1 + M_2} R \right)^2 + M_2 \left(\frac{M_1}{M_1 + M_2} R \right)^2 = \frac{M_1 M_2}{M_1 + M_2} R^2$$

Tallverdier

$$\mu = \frac{M_1 M_2}{M_1 + M_2} = 1.62 \cdot 10^{-27} \text{ kg.}$$

Austanden finnes fra

$$\delta \Delta E = \frac{\hbar^2}{I} \approx \frac{\hbar^2}{\mu R^2}$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow R^2 &= \frac{\hbar^2}{\mu \delta \Delta E} = \frac{(1.055 \cdot 10^{-34})^2}{1.62 \cdot 10^{-27} \cdot 0.026 \cdot 1.6 \cdot 10^{-19}} \\ &= 1.28 \cdot 10^{-10} \text{ m.} \end{aligned}$$

b)

Kraftkonstanten er lik $V''(R_0)$; vi
 rekentviler omkring likevektspunktet R_0
 og får da

$$V(R) = V(R_0) + \underbrace{V'(R_0)}_0 (R-R_0) + \frac{1}{2} V''(R_0) (R-R_0)^2 + \dots$$

$$\Rightarrow K = V''(R_0)$$

Nullpunktenergien er $E_0 = \frac{1}{2} \hbar \omega_0 = \frac{1}{2} \hbar \sqrt{\frac{K}{\mu}}$

Før Ar₂

$$K = \frac{72 \cdot (1.05 \cdot 10^{-2} \text{ eV}) (1.6 \cdot 10^{-19} \text{ J/eV})}{2^{4/3} \cdot (3.4 \cdot 10^{-10} \text{ m})^2} = 0.83 \text{ J/m}^2$$

Som gir

$$E_0 = \frac{1}{2} (1.05 \cdot 10^{-34}) \sqrt{\frac{0.83}{\frac{39.95 \cdot 1.67 \cdot 10^{-27}}{2}}} = 2.6 \cdot 10^{-22} \text{ J}$$

$$= \underline{1.6 \text{ meV}}$$

Bindingsenergien:

$$E_B = E - E_0 = 10.5 - 1.6 \text{ meV} = 8.9 \text{ meV}$$

He₂: ~~$E_0 = \frac{1}{2}$~~

$$K = \frac{72 \cdot (8.79 \cdot 10^{-4}) \cdot 1.6 \cdot 10^{-19}}{2^{4/3} \cdot (2.56 \cdot 10^{-10})^2} = 0.123 \text{ J/m}^2$$

$$E_0 = \frac{1}{2} 1.05 \cdot 10^{-34} \sqrt{\frac{0.123}{\frac{4 \cdot 1.67 \cdot 10^{-27}}{2}}} = 3.18 \cdot 10^{-22} \text{ J}$$

$$= 2.0 \text{ meV}$$

Bindingsenergi:

$$E_B = E - E_0 = 0.88 - 2.0 \text{ meV} < 0$$

\Rightarrow Ingen binding

b) Ar har fulle skall. Vekselvirkningene er derfor av typen dipol-dipol
o. instantan dipol-indusert dipol.

Dette er den såkalte van der Waals vekselvirkning. Som for lange avstander er proporsjonal med $1/R^6$

Lennard-Jones er et fenomenologisk potensial som for lange avstander $\sim 1/R^6$

$$V_{LJ} = 4\epsilon \left(\left(\frac{\sigma}{R} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{R} \right)^6 \right)$$

Med $M = 12$

$$V_{LJ} = 4\epsilon \left(\left(\frac{\sigma}{R} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{R} \right)^6 \right)$$

c)

$$V(R) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{R} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{R} \right)^6 \right]$$

$$V''(R) = \frac{4\epsilon}{R^2} \left[12 \cdot 13 \left(\frac{\sigma}{R} \right)^{12} - 6 \cdot 7 \left(\frac{\sigma}{R} \right)^6 \right]$$

$$V'(R_0) = -\frac{4\epsilon}{R_0} \left[12 \left(\frac{\sigma}{R_0} \right)^{12} - 6 \left(\frac{\sigma}{R_0} \right)^6 \right] = 0$$

$$\left(\frac{\sigma}{R_0} \right) = \frac{1}{2} \quad \Rightarrow \quad R_0 = 2^{1/6} \cdot \sigma$$

Som innsett gir

$$V''(R_0) = \frac{4\epsilon}{2^{1/3} \cdot \sigma^2} \left(\frac{12 \cdot 13}{4} - \frac{6 \cdot 7}{2} \right) = \frac{72\epsilon}{2^{1/3} \sigma^2}$$

d)

Energien er med de oppgitte bølgefunksjoner gitt av

$$E_{\pm} = \frac{\int \psi_{\pm}^* H \psi_{\pm} dx}{\int |\psi_{\pm}|^2}$$

Neumeren i dette uttrykket blir

$$D = \frac{1}{2} \int (|\phi_a|^2 + |\phi_{-a}|^2 \pm 2\phi_a \phi_{-a}) dx$$

$$= 1 \pm \Delta \quad \text{med } \Delta = \int \phi_a \phi_{-a} dx$$

Δ blir liten for stor separasjon mellom brønnene; liten overlap av b.f.

Teller:

$$N = \frac{1}{2} \int (\phi_a \pm \phi_{-a}) H (\phi_a \pm \phi_{-a}) dx$$

$$= \frac{1}{2} \int \phi_a^* H \phi_a dx + \int \phi_{-a}^* H \phi_{-a} dx \pm \int \phi_a^* H \phi_{-a} dx + \int \phi_{-a}^* H \phi_a dx$$

ϕ_a er en egenfunksjon av en oscillator plassert i $+a$ og tilsvarende for ϕ_{-a}

Vi kan skrive for det første integralet

$$\int \phi_a^* H \phi_a dx = \int \phi_a (T + V_{\text{obst}} + V_{\text{venst}} - V_{\text{rekt}}) \phi_a dx$$

$$= \int \phi_a H_{\text{enke}} \phi_a dx + \int \phi_a (V_{\text{obst}} - V_{\text{venst}}) \phi_a dx$$

$$= E_0 + K$$

Der:

$$K = \int \phi_a \Delta V \phi_a dx = \int \phi_a V_2 \phi_a dx$$

$$V_2 = 0 \quad \text{for } x > 0$$

$$V_2 = V_{\text{dobb}} - V_{\text{enk}} = \frac{1}{2}k(x+a) - \frac{1}{2}k(x-a) \quad x < 0$$
$$= 2kxa \quad \text{for } x < 0$$

Hele området kan skrives på formen

$$V_2 = -k(-x + |x|)a$$

Hele analogt finner vi at

$$K = \int \phi_{-a}^2 V_1(x) dx$$

$$\text{med } V_1(x) = -k(x + |x|)$$

vi kan i tillegg ledd av formen

$$\pm \int \phi_a \mp \phi_{-a} dx = \pm \int \phi_a H_{-a} \phi_a dx \pm \int \phi_a (V_{\text{dobb}} - V_{\text{enk}}) \phi_{-a} dx$$
$$= \pm \epsilon_0 \Delta \pm \int \phi_a \phi_{-a} V_1(x) dx = \pm \epsilon_0 \Delta \pm S$$

Sammen med alle ledd får vi

$$E_{\pm} = \frac{\epsilon_0(1 \pm \Delta) + K \pm S}{1 \pm \Delta} = \epsilon_0 + \frac{K \pm S}{1 \pm \Delta}$$
$$= \epsilon_0 + K \pm S + O(\Delta^2)$$

$$S = \int \phi_{-a} V_1(x) \phi_a dx$$

$$= - \left(\frac{2\alpha}{\pi} \right) ka \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\alpha(x+a)^2} \cdot e^{-\alpha(x-a)^2} (x+|x|)$$

$$= - \frac{4\alpha}{\pi} ka e^{-2\alpha a^2} \int_0^a dx e^{-2\alpha x^2} \cdot x$$

$$= B e^{-2\alpha a^2}$$

Dette gir

$$E_- - E_+ = -2Sa e^{-2\alpha a^2}$$