Oppgave 1 a) Når $-L/2 \le x \le L/2$ er løsningene på Sch.l. $-\frac{\hbar^2}{2m}\psi'' = E\psi$
$\cos kx$ eller $\sin kx$, med $2mE/\hbar^2 = k^2$.
Med $x > L/2$ blir Sch.l. $-\frac{\hbar^2}{2m}\psi'' = (E - V_0)\psi = -\frac{\hbar^2\kappa^2}{2m}\psi$,
altså: $\psi'' = \kappa^2\psi$ med løsninger $\psi = e^{\pm\kappa x}$. Bare minus-tegnet er akseptabelt når $\int_{-\infty}^{\infty} dx|\psi|^2 < \infty$
Tilsvarende, når $x < L/2$: $\psi = e^{+\kappa x}$.
Like paritet gir da

$$\psi(x) = \begin{cases} a e^{+\kappa x} & x \le -L/2 \\ b \cos kx & -L/2 \le x \le L/2 \\ a e^{-\kappa x} & x \ge L/2 \end{cases} \quad \text{q.e.d.}$$

a, b konstanter

$\psi(-x) = \psi(x)$ eller $\psi(-x) = -\psi(x)$
like paritet — odde paritet

I dette potensialet må $E < V_0$ for alle bundne tilstander. Definer: k, k_0 og κ ved:

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \; ; \; V_0 = \frac{\hbar^2 k_0^2}{2m} \; ; \; V_0 - E = \frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m} \; ; (\kappa^2 = k_0^2 - k^2)$$

b) Tilsvarende: Odde paritet må ha formen

$$\psi(x) = \begin{cases} -c e^{+\kappa x} \\ d \sin kx \\ +c e^{-\kappa x} \end{cases} \quad c, d \text{ konstanter.}$$

c) Like paritet. Grensebet. ved $x = L/2$ (de ved $x = -L/2$ må ~~nødvendigvis~~ av symmetrigrunner gi samme betingelser):

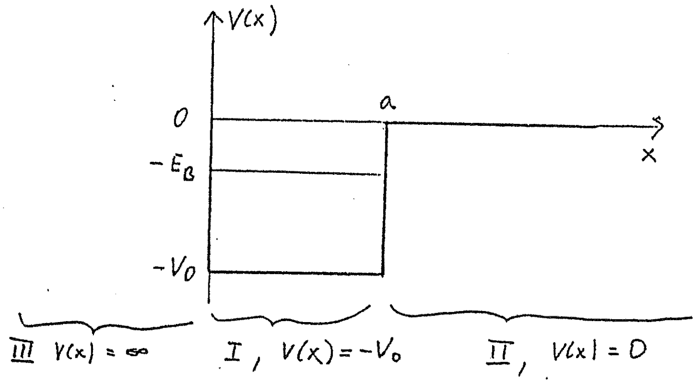
$$\psi\left(\tfrac{L}{2}\right) = a e^{-\kappa L/2} = b \cos \tfrac{kL}{2}$$
$$\psi'\left(\tfrac{L}{2}\right) = -\kappa a e^{-\kappa L/2} = -k b \sin \tfrac{kL}{2}$$

Divider siste likning med første:

$$\operatorname{tg} \frac{kL}{2} = \frac{\kappa}{k} \qquad \text{q.e.d.}$$

d) Odde paritet:

$$\left.\begin{aligned} \psi\left(\tfrac{L}{2}\right) &= c e^{-\kappa L/2} = d \sin \tfrac{kL}{2} \\ \psi'\left(\tfrac{L}{2}\right) &= -\kappa c e^{-\kappa L/2} = k d \cos \tfrac{kL}{2} \end{aligned}\right\} \quad \operatorname{tg} \frac{kL}{2} = -\frac{k}{\kappa}$$



Vi studerer her bundne tilstander, dvs. $E = -E_B$ der $0 < E_B < V_0$

I område I blir da Schrödingerligningen:

$$\psi'' = -\frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E_B)\psi$$

$$\equiv -k^2\psi \qquad (1)$$

der:

$$k = \left(\frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E_B)\right)^{1/2} \qquad (2)$$

med generell løsning:

$$\psi_I(x) = C_1^I \sin(kx) + C_2^I \cos(kx) \qquad (3)$$

I område II blir Schrödingerligningen:

$$\psi'' = \frac{2mE_B}{\hbar^2}\psi \equiv \varkappa^2 \psi \qquad (4)$$

der:

$$\varkappa = \left(\frac{2mE_B}{\hbar^2}\right)^{1/2} \qquad (5)$$

med generell løsning:

$$\psi_{II}(x) = C_1^{II} e^{-\varkappa x} + C_2^{II} e^{\varkappa x} \qquad (6)$$

Randkrav:

i) Kravet om kvadratisk integrerbarhet gir:

$$\psi(x \to \infty) \to 0 \qquad (7)$$

$$\Rightarrow \quad C_2^{II} = 0$$

ii) Fra punkt 3.1. i forelesningene har vi at $\psi(x) = 0$ når $V(x) = \infty$. Dette sammen med at $\psi(x)$ må være kontinuerlig, gir:

$$\psi(0) = 0 \qquad (8)$$

$$\Rightarrow \quad C_2^{I} = 0$$

Vi står da igjen med:

$$\psi_I(x) = C_1^I \sin(kx) \qquad (9)$$

$$\psi_{II}(x) = C_1^{II} e^{-\varkappa x} \qquad (10)$$

Fra pkt. 3.1. i forelesningen har vi også skjøtingsbetingelsene:

$$\psi_I(a) = \psi_{II}(a) \qquad (11)$$

og:

$$\psi_I'(a) = \psi_{II}'(a) \qquad (12)$$

som gir:

$$C_1^I \sin(ka) = C_1^{II} e^{-\varkappa a} \qquad (13)$$

og:

$$kC_1^I \cos(ka) = -\varkappa C_1^{II} e^{-\varkappa a} \qquad (14)$$

(14) dividert med (13) gir:

$$k \cot(ka) = -\varkappa \qquad (15)$$

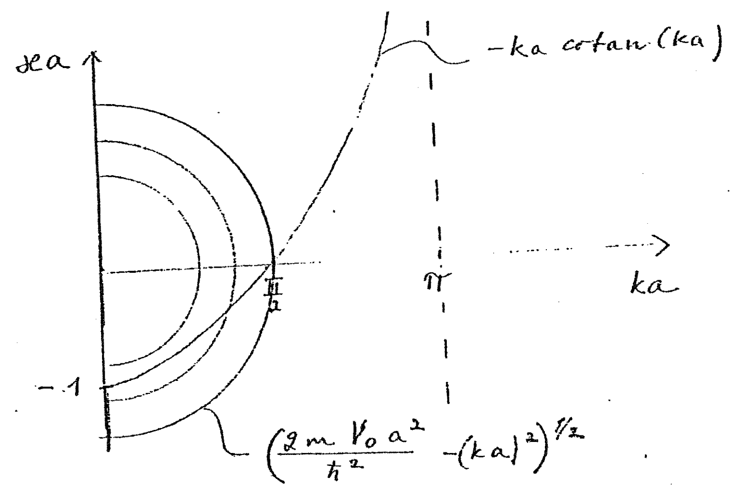
og videre ved hjelp av ligń. (2) og (5):

$$\varkappa a = -ka \cot(ka)$$

$$= \left(\frac{2mV_0 a^2}{\hbar^2} - (ka)^2\right)^{1/2} \qquad (16)$$

Vi har her to uttrykk for $\varkappa a$ som i prinsipp bestemmer hvilke verdier for k (og dermed for E_B) som er løsninger for dette problemet. Vi kan imidlertid ikke finne eksplisitte uttrykk analytisk for disse E_B-verdiene.

Vi kan imidlertid fremstille begge uttrykk for $\varkappa a$ grafisk s.f.a. ka og på den måten finne løsningen på vår oppgave. Vi merker oss da at både $\varkappa a$ og ka er positive (se ligen. (2) og (5)) og at det siste uttrykket for $\varkappa a$ i lign. (17) representerer en sirkel med radius $\left(\frac{2mV_0a^2}{\hbar^2}\right)^{1/2}$.
Vi får da følgende skisse:



I skissen tilsvarer de forskjellige halvsirklene forskjellige verdier for m. Vi ser at vi bare kan få løsning av lign. (16) for positive $\varkappa a$ og ka (dvs. få bundne tilstander) dersom:

$$\left(\frac{2mV_0a^2}{\hbar^2}\right)^{1/2} > \frac{\pi}{2}$$

som gir:

$$m > \frac{\pi^2\hbar^2}{8a^2V_0} \qquad (17)$$

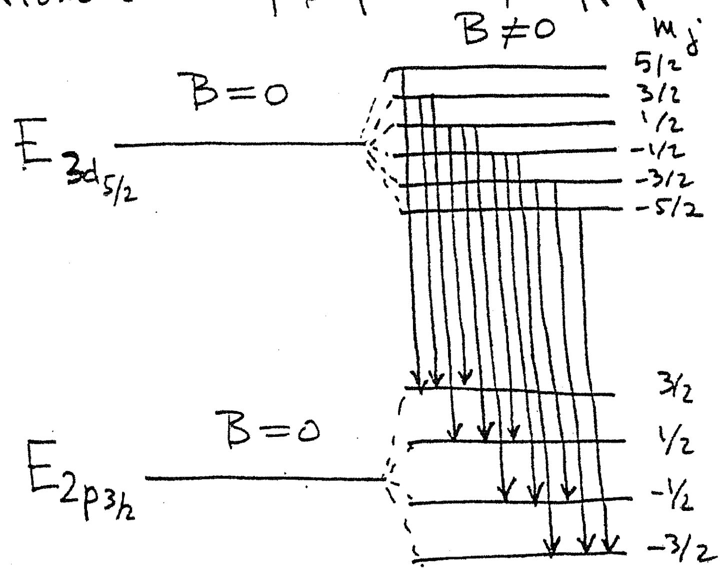
Oppgave 2

a) I denne oppgaven skal vi anvende Landés g-faktor

$$g = 1 + \frac{j(j+1) - \ell(\ell+1) + s(s+1)}{2j(j+1)}$$

til å se på oppsplittingen ~~som~~ et $\vec{B}$-felt gir av linjen som følger av den elektriske dipolovergangen $3d_{5/2} \to 2p_{3/2}$. Utvalgsregelen $\Delta \ell = \pm 1$ er åpenbart oppfylt når $d \to p$ $(\ell=2 \to \ell=1)$. Og $\Delta j = \frac{3}{2} - \frac{5}{2} = -1$ er også OK for el. dipol overgang. Dessuten har vi regelen $\Delta m_j = 0, \pm 1$.

b) Nivåene blir, skjematisk, oppsplittet som følger



Landé-faktoren

$$g_d = 1 + \frac{\frac{5}{2}\cdot\frac{7}{2} - 2\cdot 3 + \frac{1}{2}\cdot\frac{3}{2}}{2\cdot\frac{5}{2}\cdot\frac{7}{2}} = \frac{6}{5}$$

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

Energiforskyvningen relativt energidifferansen mellom nivåene i $B=0$ er

$$\delta E = \mu_B B \left[g_d (m_j)_{før} - g_p (m_j)_{etter} \right]$$

Dvs:

Δm_j	$\frac{5}{2} \to \frac{3}{2}$	$\frac{3}{2} \to \frac{3}{2}$	$\frac{3}{2} \to \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2} \to \frac{3}{2}$	$\frac{1}{2} \to \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2} \to -\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2} \to \frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2} \to -\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2} \to -\frac{3}{2}$	osv.
$\delta E / \mu_B B$	1	$-1/5$	$17/15$	$-7/5$	$-1/15$	$19/15$	$-19/15$	$1/15$	$7/5$	

Alle 12 mulighetene gir forskjellige energiforskyvninger. Altså: 12 linjer er resultatet når $3d_{5/2} \to 2p_{3/2}$ overgangen utsettes for et magnetfelt!

Oppgave 3

a Ortogonalitet: Med $\int d\Omega \equiv \int_{-\pi}^{\pi} d\varphi \int_0^{\pi} d\theta \sin\theta$ har en

$$\int d\Omega\, p_x^* p_z = \frac{1}{\sqrt{2}} \int d\Omega \left(-Y_{11}^* Y_{10} + Y_{1-1}^* Y_{10}\right) = 0$$

Dette må være null siden Y_{lm} alle er ortogonale. Helt tilsvarende må p_y & p_z være ortogonale.

$$\int d\Omega\, p_x^* p_y = \frac{i}{2} \int d\Omega \left(-|Y_{1,1}|^2 - Y_{1,1}^* Y_{1,-1} + Y_{1,-1}^* Y_{1,1} + |Y_{1,-1}|^2\right)$$

Kryssleddene gir null av samme grunn som før, mens diagonalleddene slår hverandre ihjel, siden alle Y_{lm} er normert til 1: $\int d\Omega |Y_{lm}|^2 = 1$.

Normering

$$\int d\Omega |p_x|^2 = \frac{1}{2} \int d\Omega \left(|Y_{1,1}|^2 - Y_{1,1}^* Y_{1,-1} - Y_{1,-1}^* Y_{1,1} + |Y_{1,-1}|^2\right)$$

$$= \frac{1}{2}(1+1) = 1.$$

og tilsvarende for p_y:

$$\int d\Omega |p_y|^2 = \frac{1}{2} \int d\Omega \left(|Y_{11}|^2 + Y_{11}^* Y_{1-1} + Y_{1-1}^* Y_{11} + |Y_{1-1}|^2\right) = 1$$

Tilslutt

$$p_x = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin\theta\, e^{i\varphi} + \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin\theta\, e^{-i\varphi}\right) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \sin\theta\, \frac{1}{2}\left(e^{i\varphi} + e^{-i\varphi}\right)$$

$$= \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \sin\theta \cos\varphi$$

$$p_y = \frac{i}{\sqrt{2}} \left(-\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin\theta\, e^{i\varphi} + \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin\theta\, e^{-i\varphi}\right) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \sin\theta \sin\varphi$$

Men $(\sin\theta\cos\varphi, \sin\theta\sin\varphi, \cos\theta)$ er nettopp x, y & z-komponentene av en vilkårlig enhetsvektor og p_x, p_y, p_z har derfor samme symmetri som aksene x, y, z.

som med rimelig tilnærmelse kan identifiseres med H-tilstanden $n=1, \ell=0$, men med $Z=2$

b) I He atomets grunntilstand er <u>begge</u> elektronene i rom-tilstanden Φ_{10}. Romdelen av $\Psi_1(1,2)$ er derved symmetrisk, og spinndelen må være antisymm.:

$$\Psi_1(1,2) = \phi_{10}(\vec{r}_1)\,\phi_{10}(\vec{r}_2)\cdot\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\chi_\uparrow(1)\chi_\downarrow(2) - \chi_\downarrow(1)\chi_\uparrow(2)\right)$$

Spinn singlett

Nest laveste energier får en med ett elektron i Φ_{10} og ett i Φ_{20}. Romdelen kan da velges symmetrisk eller antisymmetrisk. Lavest energi får den antisymmetriske muligheten, siden den gir større middelavstand mellom elektronene, og derved lavere (frastøtnings-) Coulomb energi. Altså

$$\Psi_2(1,2) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\phi_{10}(\vec{r}_1)\phi_{20}(\vec{r}_2) - \phi_{20}(\vec{r}_1)\phi_{10}(\vec{r}_2)\right)$$

$$\cdot\begin{cases} \chi_\uparrow(1)\,\chi_\uparrow(2) \\ \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\chi_\uparrow(1)\chi_\downarrow(2) + \chi_\downarrow(1)\chi_\uparrow(2)\right) \\ \chi_\downarrow(1)\,\chi_\downarrow(2) \end{cases}$$

Spinn triplett

<u>En</u> av de 3 mulige symmetriske spinntilstandene i spinntripletten er realisert. Strengt tatt er derfor dette 3 <u>forskjellige</u> tilstander, og det tilsvarende energinivå har degenerasjonsgrad 3.

Litt høyere energi enn Ψ_2-tilstanden(e) har

$$\Psi_3(1,2) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\phi_{10}(\vec{r}_1)\phi_{20}(\vec{r}_2) + \phi_{20}(\vec{r}_1)\phi_{10}(\vec{r}_2)\right)\cdot$$

$$\cdot\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\chi_\uparrow(1)\chi_\downarrow(2) - \chi_\downarrow(1)\chi_\uparrow(2)\right)$$

Spinn singlett

Ψ_1 & Ψ_3 : Para-He ; Ψ_2 : Orto-He.

Oppgave 4.

a) 4,64 eV

b) 18 Å

c) $\frac{\partial V}{\partial R} = 0 \Rightarrow A e^{-R_0/\rho} = \frac{\rho}{R_0}\left(\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 R_0}\right)$

$$V_0 = \frac{-e^2}{4\pi\varepsilon_0 R_0}\left(1 - \frac{\rho}{R_0}\right)$$

$$\Rightarrow \frac{\rho}{R_0} = 1 - \frac{V_0}{e^2/4\pi\varepsilon_0 R_0}$$

$$A = \frac{\frac{\rho}{R_0}\left(\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 R_0}\right)}{e^{-R_0/\rho}}.$$