SIF 4065 , AUG 2002

LØSNINGSFORSLAG.

Oppgave 1

a) Se lærebok

b) Energien til en dipol i et ytre magnetfelt kan skrives som

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

Krafta i z-retningen er da gitt som

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

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

$$F_z = -\frac{\partial B_z}{\partial z}\mu_B g_s m_s$$

Hastigheten til et hydrogenatom som kommer ut fra ovnen er gitt av

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

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

Traverstiden er da gitt av

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

Legg merke til at vi skrev $2kT$, ikke $3/2 kT$
Dette kommer fra at hastigheten ut fra en liten åpning (såkalt effusjon) i middel er større enn rms hastigheten.

Utslaget i z-retningen for et spinn opp atom blir da

$$z = \frac{1}{2} a_z t^2 = \frac{1}{2} \frac{F_z}{m} L_x^2 \frac{m}{4kT}$$

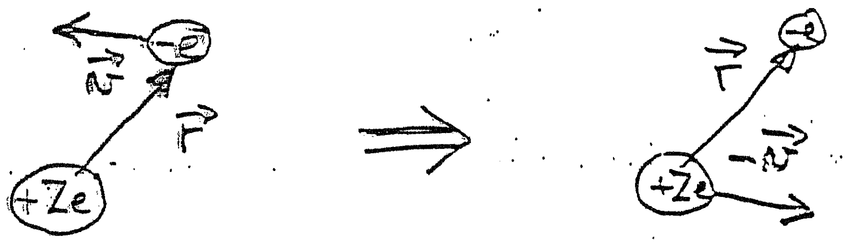
$$= -\frac{\frac{\partial B_z}{\partial z} \mu_B g_s m_s L_x^2}{8kT}$$

$$= \frac{15 \cdot 0.92 \cdot 10^{-23}\, 2 \cdot \frac{1}{2} \cdot 0.8^2}{8 \cdot 1.38 \cdot 10^{-23} \cdot 500} = 1.6 \cdot 10^{-3}\ m$$

og tilsvarende for spin ned. Dette gir en splitting på: 3.2 mm.

Spinn-bane kopling

Når relativistiske effekter (små!) tas med i betraktning, koples $\vec{L}$ & $\vec{S}$. Vi innser dette ved å se på verden fra ***elektronets*** ***hvilesystem***:



Labsystemet — Elektronets hvilesystem

Feltet fra Ze med hast. $-\vec{v}$, ved elektronet er:

$$\vec{B}_L = \frac{\mu_0}{4\pi}\frac{(-\vec{v}Ze)\times\vec{r}}{r^3} = \underbrace{\frac{Ze}{4\pi\varepsilon_0}\frac{\vec{r}}{r^3}}_{\text{Coul.}} \times \frac{\vec{v}}{c^2} = \frac{\vec{E}\times\vec{v}}{c^2}$$

pga dreieimpuls $\mu_0\varepsilon_0 = c^{-2}$ Mer generelt enn pkt.-ladning!

For å generalisere:

La $\vec{E} = -\nabla\phi$, og $\phi(\vec{r}) = \phi(r)$, slik at

$$\vec{E} = -\frac{\vec{r}}{r}\frac{d\phi}{dr}$$ For det generelle tilfellet, forutsatt ***kulesymmetri***

Da:

$$\vec{B}_L = -\frac{1}{r}\frac{d\phi}{dr}\frac{\vec{r}\times\vec{v}}{c^2} = -\frac{1}{m_e c^2}\frac{1}{r}\frac{d\phi}{dr}\vec{L} \qquad (\vec{L} = \vec{r}\times\vec{p})$$

Derved

$$V_{SL} = -\vec{\mu}_s\cdot\vec{B}_L = -\frac{g_s\mu_B}{m_e c^2\hbar}\frac{1}{r}\frac{d\phi}{dr}\vec{S}\cdot\vec{L}$$ I elektronets hvilesystem!

Men vi må tilbake fra det *akselererte* hvilesystemet til elektronet, til *labsystemet*. Etter anstrengende (gen.) relativistiske transformasjoner (L.H. Thomas) er sluttresultatet det samme som ovenfor, dividert med en faktor 2!

Altså: $$V_{SL} = -\frac{e^2}{2m_e^2c^2}\cdot\frac{1}{r}\frac{d\phi}{dr}\vec{S}\cdot\vec{L} = \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{S\cdot L}{2m_e^2c^2r^3}$$

Siden $L=0$ er det ingen spin-bane splitting av grunntilstanden til H.

e) Energien til et magnetisk moment i et magnetfeldt B er gitt av

$$\Delta E = -\vec{\mu}\cdot\vec{B}$$

Dette betyr at det tilsynelatende magnetfeltet er gitt som

$$B = \frac{\Delta E}{|\mu|} \approx \frac{\Delta E}{\mu_B} = \frac{10^{-23}}{0.92\cdot 10^{-23}} \approx 1.1\,T.$$

Oppgave 2.

a) Når $-L \leq x \leq L$ er bølgefunksjonen en løsning av: $-\frac{\hbar^2}{2m}\psi'' = E\psi$

Dette fører til løsninger av formen $\psi \sim \cos kx$ eller $\psi \sim \sin kx$ med $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$

For $x \geq L$ er ψ en løsning av

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

ɔ: $\psi'' = \alpha^2\psi$ med løsning $\psi \sim e^{\pm\alpha x}$

Bare minustegnet er akseptabelt for $x \geq L$, og plusstegnet for $x \leq -L$.

Like paritet gir da en bølgefunksjon

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{\alpha x} & x \leq -L \\ B\cos kx & -L \leq x \leq L \\ Ae^{-\alpha x} & x \geq L \end{cases}$$

$\psi(x) = \psi(-x)$ er oppfylt, ɔ: like paritet

b) Tilsvarende for odde paritet

$$\psi(x) = \begin{cases} -Ae^{\alpha x} & x \leq -L \\ B\sin kx & -L \leq x \leq L \\ Ae^{-\alpha x} & x \geq L \end{cases}$$

c) Grensebetingelsene er at ψ og ψ' er kontinuerlige for $x = \pm L$

Like paritet:

ψ kont: $$A e^{-\alpha L} = B \cos kL$$

ψ' —"— $$-\alpha A e^{-\alpha L} = -kB \sin kL$$

Divider disse to ligningene med hverandre. Det gir

$$\underline{\underline{\operatorname{tg} kL = \frac{\alpha}{k}.}}$$

Odde paritet:

ψ kont: $$A e^{-\alpha L} = B \sin kL$$

ψ' —"— $$-\alpha A e^{-\alpha L} = kB \cos kL$$

Divider $\Rightarrow$

$$\underline{\underline{\operatorname{cotg} kL = -\frac{\alpha}{k}}}$$

d) Normering: $$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi|^2 dx = 1$$

$\Rightarrow$

$$B^2 \int_0^L \cos^2 kx \, dx + A^2 \int_L^{\infty} e^{-2\alpha x} dx = \frac{1}{2}$$

$$B^2 \Big|_0^L \left(\frac{1}{2k}\sin kx\cos kx + \frac{1}{2}x\right) + \frac{A^2}{-2\alpha}\Big|_L^\infty e^{-2\alpha x} = \frac{1}{2}$$

$$B^2\left(\frac{1}{2k}\sin kL\cos kL + \frac{1}{2}L\right) + \frac{A^2}{2\alpha}e^{-2\alpha L} = \frac{1}{2}$$

Vi benytter oss av grensebetingelsene

$$Ae^{-\alpha L} = B\cos kL$$

$$-\alpha Ae^{-\alpha L} = -Bk\sin kL$$

$$B^2\left(\frac{1}{2k}\sin kL\cos kL + \frac{1}{2}L\right) + B\cos kL \cdot B\frac{k}{2\alpha^2}\sin kL = \frac{1}{2}$$

$$B^2\left(\left(\frac{1}{2k} + \frac{k}{2\alpha^2}\right)\sin kL\cos kL + \frac{1}{2}L\right) = \frac{1}{2}$$

Dette gir B, men uttrykket kan forenkles videre

$$\operatorname{tg} kL = \frac{\alpha}{k}$$

$$\Rightarrow \quad \sin kL = \frac{\operatorname{tg} kL}{\sqrt{1+\operatorname{tg}^2 kL}}, \quad \cos kL = \frac{1}{\sqrt{1+\operatorname{tg}^2 kL}}$$

$$\Rightarrow \quad B^2\left[\frac{1}{2}\left(\frac{1}{k} + \frac{k}{\alpha^2}\right)\frac{\alpha/k}{\sqrt{1+\alpha^2/k^2}}\frac{1}{\sqrt{1+\alpha^2/k^2}} + \frac{1}{2}L\right] = \frac{1}{2}$$

$$\Rightarrow \quad B^2\left(\frac{1}{\alpha} + L\right) = 1$$

$$\underline{\underline{B^2 = \frac{1}{L + \frac{1}{\alpha}}}}$$

$$A = \frac{B \cdot e^{\alpha L}}{\sqrt{1+\alpha^2/k^2}}$$

e) Endringen i energi p.g. av pertubasjonen er til laveste orden gitt av

$$\Delta E = \int |\psi(x)|^2 \Delta V \, dx$$

$\Rightarrow$: ΔE er liten dersom ψ er liten i området der $\Delta V \neq 0$. Dette betyr:

Symmetriske bølgefunksjoner:

ΔE er størst dersom perturbasjonen er i sentrum av brønnen.

Antisymmetriske bølgefunksjoner

ΔE er liten både når perturbasjonen er i sentrum og nær kanten. Den er størst når perturbasjonen er ~~er~~ i nærheten av $\pm L/2$.

Oppgave 3.

a) Kinetisk energi $E_k = \frac{P^2}{2M} + \frac{p^2}{2m}$

Potensiell $E_v = \frac{1}{2}k(x - X)^2$

$$\Rightarrow H = \frac{P^2}{2M} + \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}k(x - X)^2$$

$$\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$$

b) Vi innfører nye koordinater

$$Q = \frac{mx + MX}{m + M}$$ Tyngdepunktskoord.

$$q = x - X$$ Relative koord.

$$\Rightarrow X = Q - \frac{m}{m+M} q$$

$$x = Q + \frac{M}{m+M} q$$

Disse settes inn i uttrykkene for Ekin og Epot

$$E_k = \frac{1}{2}M\dot{X}^2 + \frac{1}{2}m\dot{x}^2 = \frac{1}{2}M\left(\dot{Q} - \frac{m}{m+M}\dot{q}\right)^2 + \frac{1}{2}m\left(\dot{Q} + \frac{M}{m+M}\dot{q}\right)^2$$

$$= \frac{1}{2}(m+M)\dot{Q}^2 + \frac{1}{2}\frac{mM}{m+M}\dot{q}^2$$

$$= \frac{P_Q^2}{2(m+M)} + \frac{P_q^2}{2\mu} \qquad \mu = \frac{m \cdot M}{m+M}$$

$$E_{pot} = \frac{1}{2} k q^2$$

Hamiltonfunksjonen:

$$\mathcal{H} = \frac{P_Q^2}{2(m+M)} + \frac{p_q^2}{2\mu} + \frac{1}{2} k q^2$$

c) Vi forsøker med å skrive

$$\psi = \chi(Q)\,\phi(q)$$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2(m+M)} \nabla_Q^2 - \frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_q^2 + \frac{1}{2} k q^2\right) \chi(Q)\,\phi(q) = E \chi \phi$$

$$\Rightarrow \underbrace{-\frac{1}{\chi(Q)} \frac{\hbar^2}{2(m+M)} \frac{d^2 \chi(Q)}{dQ^2}}_{K_1^2} \underbrace{- \frac{1}{\phi(q)} \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2\phi(q)}{dq^2} + \frac{1}{2} k q^2}_{K_2} = E$$

$$\Rightarrow \frac{\hbar^2}{2(m+M)} \frac{d^2\chi}{dQ^2} = -K_1 \chi$$

Med løsning: $\chi(Q) = e^{\pm i k_1 Q}$

og energi $\quad E_Q = \frac{\hbar^2 K_1^2}{2(m+M)}$

Den andre delen gir

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2\phi(q)}{dq^2} + \frac{1}{2} k q^2 = E - E_Q$$

ɔ: ϕ er bølgefunksjonen for en harmonisk oscillator

Total E er da gitt av

$$E = \frac{\hbar^2 K_1^2}{2(m+M)} + (n+\tfrac{1}{2})\hbar\omega_\mu$$

med $\omega_\mu = \sqrt{\frac{k}{\mu}}$.

Når $M \to \infty$ går $\mu \to m$, vi får den vanlige harmoniske oscillatoren.

d) Schrödingerligningen

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}kx^2 - e\mathcal{E}x\right)\psi(x) = E\psi(x)$$

Dette kan omformes

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}k\left(x^2 - \frac{2e\mathcal{E}}{k}x + \frac{e^2\mathcal{E}^2}{k^2} - \frac{e^2\mathcal{E}^2}{k^2}\right)\right)\psi = E\psi$$

$$\Rightarrow \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}k\left(x - \frac{e\mathcal{E}}{k}\right)^2\right)\psi(x) = \left(E + \frac{e^2\mathcal{E}^2}{2k}\right)\psi$$

Dette er en harmonisk oscillator sentrert omkring $x = \frac{e\mathcal{E}}{k}$.

Energien er da gitt av

$$E = (n+\tfrac{1}{2})\hbar\omega_c - \frac{e^2\mathcal{E}^2}{2k}$$

$$\omega_c = \sqrt{\frac{k}{m}}.$$

Oppgave 4.

a) Se oppgave 3.

Energiforskjellen mellom grunntilstanden og lavest eksiterte tilstand er gitt av $\Delta E = \hbar\omega_c$
med $\omega_c = \sqrt{\frac{K}{\mu}}$

$$\mu = \frac{mM}{m+M} = \frac{1\cdot 35.5}{1+36.5}\cdot m_H = \frac{35.5}{36.5}\, 1.67\cdot 10^{-27}\,kg$$

Dette gir
$$\Delta E = \hbar\omega_c = 1.055\cdot 10^{-34}\sqrt{\frac{470}{1.62\cdot 10^{-27}}}\cdot\frac{1}{1.6\cdot 10^{-19}} = 0.35\,eV$$

b) Rotasjonsenergien er gitt av

$$E_r = \frac{\hbar^2}{2I}\, r(r+1) \qquad r = 0, 1, 2 \ldots$$

Energiforskjellen mellom de to laveste nivåene:

$$\Delta E = \frac{\hbar^2}{2I}(1\cdot 2 - 0\cdot 1) = \frac{\hbar^2}{I}$$

$$= \frac{1.055\cdot 10^{-34}}{2.66\cdot 10^{-47}\ 1.6\cdot 10^{-19}} = 2{,}6\cdot 10^{-3}\,eV$$

Dette er 142x lavere enn forskjellen mellom to vibrasjonsnivåer. Derimot, dersom vi setter

$\frac{\hbar^2}{2I} r(r+1) = 0.35\,eV$ finner vi

$r =$

$$r(r+1) = \frac{0.35}{\frac{\hbar^2}{I}} = \frac{0.70}{0.0026} = 269$$

$\Rightarrow r = 17$

$\therefore$ Det er 17 rotasjonsnivåer mellom to vibrasjonsnivåer i dette tilfellet.

c) Vi forutsetter Boltzmann statistikk

Det gir

$$e^{-\frac{\Delta E}{kT}} = e^{-1} \qquad \Delta E = 0.35\,eV$$

$$\Rightarrow \underline{\underline{T = 3675\,K}}$$