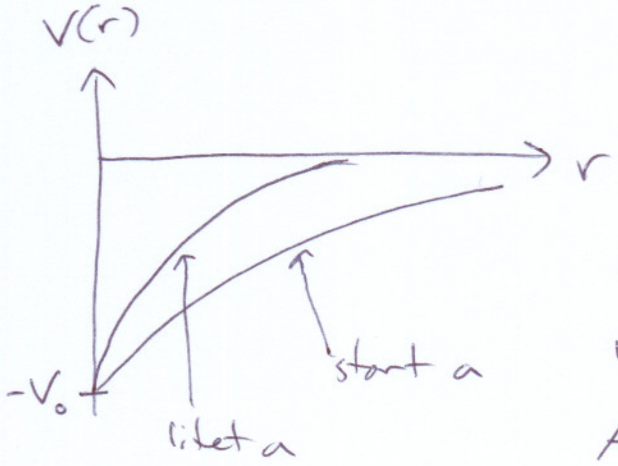
KVANTROV 9

XI 3 Partikel med massa m rör sig i potential

$$V(r) = -V_0 e^{-r/a}, \quad V_0 = \frac{4\hbar^2}{3ma^2}$$



Uppskatta grund-E m. var.-metoden.

Använd $\psi(r) = Ne^{-\alpha r}$

Kom ihåg:

1. Normera
2. Beräkna $\hat{H}\psi$
3. Beräkna $\langle \hat{H} \rangle = \int dV \psi^* \hat{H} \psi$
4. Minimera $\langle \hat{H} \rangle$ m.a.p. $\alpha \Rightarrow E_0 \leq \min_\alpha \langle \hat{H} \rangle$

---

① $1 = \int dV \psi^* \psi = 4\pi \int_0^\infty r^2 dr\, N^2 e^{-2\alpha r} = 4\pi \frac{N^2}{4\alpha^3} \Rightarrow N^2 = \frac{\alpha^3}{\pi}$

② $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(r) = \{\psi = \psi(r)\} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2} r + V(r)$

Börja med att beräkna $\frac{\partial^2}{\partial r^2} r\psi$:

$$\frac{\partial}{\partial r} r\psi = \frac{\partial}{\partial r} rNe^{-\alpha r} = -\alpha r N e^{-\alpha r} + Ne^{-\alpha r}$$

$$\Rightarrow \frac{\partial^2}{\partial r^2} r\psi = -\alpha\left(-\alpha r Ne^{-\alpha r} + Ne^{-\alpha r}\right) + (-\alpha)Ne^{-\alpha r} = (\alpha^2 r - 2\alpha)Ne^{-\alpha r}$$

...

$$\ldots \Rightarrow \hat{H}\psi = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}r - V_0 e^{-r/a}\right)Ne^{-\alpha r} =$$

$$= \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r}(\alpha^2 r - 2\alpha) - V_0 e^{-r/a}\right)Ne^{-\alpha r} = \left\{V_0 = \frac{4\hbar^2}{3ma^2}\right\}$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\alpha^2 - \frac{2\alpha}{r} + \frac{8}{3a^2}e^{-r/a}\right)Ne^{-\alpha r}$$

③ $\langle\hat{H}\rangle = \int dV\, \psi^* \hat{H}\psi = 4\pi\int_0^\infty r^2 dr \frac{\hbar^2}{2m}\left(-\alpha^2 + \frac{2\alpha}{r} - \frac{8}{3a^2}e^{-r/a}\right)N^2 e^{-2\alpha r}$

$$= 4\pi\int_0^\infty dr \frac{\hbar^2}{2m}\left(-\alpha^2 r^2 + 2\alpha r - \frac{8r^2}{3a^2}e^{-r/a}\right)N^2 e^{-2\alpha r}$$

$$= \frac{4\pi\hbar^2}{2m}\int_0^\infty dr\left(\underbrace{-\alpha^2 r^2 N^2 e^{-2\alpha r}}_{\mathrm{I}} + \underbrace{2\alpha r N^2 e^{-2\alpha r}}_{\mathrm{II}} - \underbrace{\frac{8r^2}{3a^2}N^2 e^{-r(1/a+2\alpha)}}_{\mathrm{III}}\right)$$

$$\left.\begin{aligned} &\mathrm{I.}\quad -\alpha^2 N^2\int_0^\infty dr\, r^2 e^{-2\alpha r} = -\alpha^2 N^2 \frac{1}{4\alpha^3} = -\frac{N^2}{4\alpha} \\ &\mathrm{II.}\quad 2\alpha N^2 \int_0^\infty dr\, r e^{-2\alpha r} = 2\alpha N^2 \frac{1}{4\alpha^2} = \frac{N^2}{2\alpha} \end{aligned}\right\} \mathrm{I}+\mathrm{II} = \frac{N^2}{4\alpha}$$

$$\mathrm{III.}\quad -\frac{8N^2}{3a^2}\int_0^\infty dr\, r^2 e^{-r(1/a+2\alpha)} = -\frac{8N^2}{3a^2}\frac{2}{(1/a+2\alpha)^3} = -\frac{16N^2}{3a^2(1/a+2\alpha)^3}$$

$$\Rightarrow \langle\hat{H}\rangle = \frac{2\pi\hbar^2 N^2}{m}\left(\frac{1}{4\alpha} - \frac{16}{3a^2(1/a+2\alpha)^3}\right) = \left\{N^2 = \frac{\alpha^3}{\pi}\right\}$$

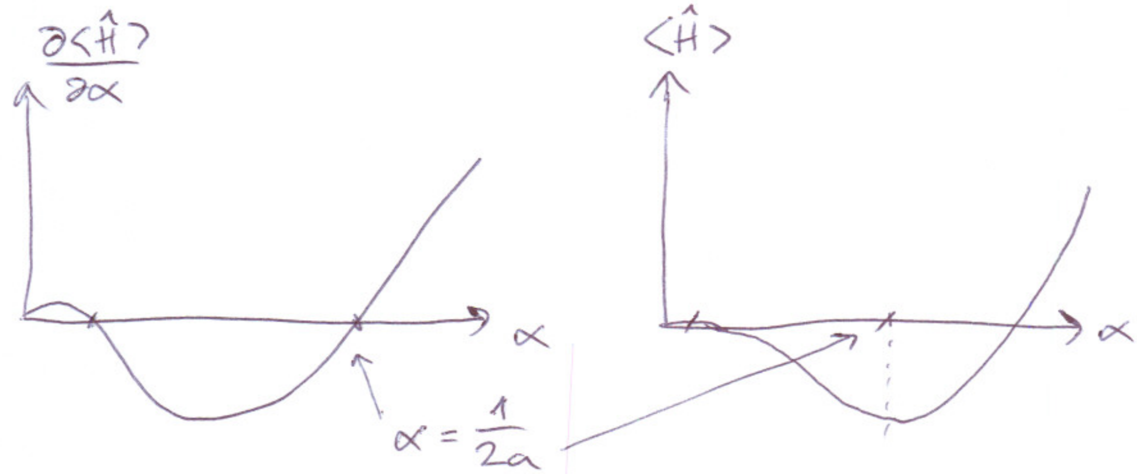
$$= \frac{2\hbar^2}{m}\left(\frac{\alpha^2}{4} - \frac{16\alpha^3}{3a^2(1/a+2\alpha)^3}\right) = \frac{2\hbar^2\alpha^2}{m}\left(\frac{1}{4} - \frac{16\,a\alpha}{3(1+2a\alpha)^3}\right)$$

...

... (4) $$\frac{\partial\langle\hat{H}\rangle}{\partial\alpha} = \ldots = \frac{2\hbar^2}{m}\alpha\left(\frac{1}{2} + \frac{8}{(1+2a\alpha)^4} - \frac{8}{(1+2a\alpha)^3}\right)$$

Sätt $\frac{\partial\langle\hat{H}\rangle}{\partial\alpha} = 0$. Ekvationen har 5 lösningar.

En är $\alpha = 0$. Förutom den finns 2 positiva och 2 negativa lösningar. Så här ser det ut för $\alpha > 0$:



$\alpha = \frac{1}{2a}$ är alltså roten vi söker. $(a\alpha = 1/2)$

$$\Rightarrow E_0 \leq \langle\hat{H}\rangle\Big|_{\alpha=\frac{1}{2a}} = \frac{2\hbar^2}{4ma^2}\left(\frac{1}{4} - \frac{8}{3(1+2\cdot 1/2)^3}\right) =$$

$$= \frac{2\hbar^2}{4ma^2}\left(\frac{1}{4} - \frac{8}{3\cdot 8}\right) = \frac{2\hbar^2}{4ma^2}\left(\frac{3}{12} - \frac{4}{12}\right)$$

$$= -\frac{\hbar^2}{24ma^2}$$

XI 11 Li som enelektronatom (en valens-e⁻)

Potential för yttersta e^- : $V_{eff} = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\left(1+2e^{-\frac{3r}{a_0}}\right)$

Störningsräkn. med $\hat{H} = \hat{H}^{(0)} + \hat{\Omega}$, där

$\hat{H}^{(0)}$ = vätehamiltonian och $\hat{\Omega} = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r} 2e^{-\frac{3r}{a_0}}$

Li: innersta skalet fullt $\Rightarrow n=2$, gr.-tillst. $\Rightarrow \ell = 0$

Ostörd vågfn: $\psi_{2s}^{(0)} = \frac{1}{\sqrt{8\pi a_0^3}}\left(1-\frac{r}{2a_0}\right)e^{-r/2a_0}$

Ostört gr.-tillst.: $E_{2s}^{(0)} = -\frac{Z^2\hbar^2}{2\mu a_0^2}\frac{1}{n^2}$

Sätt $Z=1$ (elektronen känner av 3 protoner och 2 elektroner)

$\mu = m_e$ (kärnan mycket tyngre än m_e)

$n=2$

$$\Rightarrow E_{2s}^{(0)} = -\frac{\hbar^2}{2m_e a_0^2}\cdot\frac{1}{4} = -13{,}6\,\mathrm{eV}\cdot\frac{1}{4} = -3{,}4\,\mathrm{eV} \quad (*)$$

$$E_{2s} \approx E_{2s}^{(0)} + \langle\psi_{2s}^{(0)}|\hat{\Omega}|\psi_{2s}^{(0)}\rangle = E_{2s}^{(0)} + 4\pi\int_0^\infty r^2 dr\, \psi_{2s}^* \hat{\Omega}\psi_{2s}$$

$$= \left\{\begin{matrix}\hat{\Omega}\text{ komm. m. }\psi \\ \psi\text{ reell}\end{matrix}\right\} = E_{2s}^{(0)} + 4\pi\int_0^\infty dr\, r^2 \frac{1}{8\pi a_0^3}\left(1-\frac{r}{2a_0}\right)^2 e^{-r/a_0} \times$$

$$\times\left(-\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\right)2e^{-3r/a_0} = \ldots$$

$\left\{a_0 = \frac{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}{m_e e^2}\right\}$

$$= E_{2s}^{(0)} - \frac{19}{64}\frac{e^2}{32\pi\varepsilon_0 a_0} = -\frac{\hbar^2}{2m_e a_0^2}\cdot\frac{1}{4} - \frac{19}{64}\frac{\hbar^2}{2m_e a_0^2}\cdot\frac{1}{4} \overset{(*)}{=} -3{,}4\,\mathrm{eV}\left(1-\frac{19}{64}\right)$$

$\boxed{\approx -4{,}4\,\mathrm{eV}}$

XII 3

$\vec{L}$ är vektorn för banrörelsemängdsmomentet

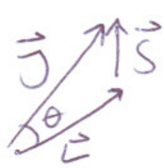
$\vec{S}$ är vektorn för spinnrörelsemängdsmomentet

$\vec{J}$ är vektorn för det totala rörelsemängdsmomentet, $\vec{J}=\vec{L}+\vec{S}$

Sökt: Vinkeln mellan $\vec{J}$ och $\vec{L}$ för tillståndet $^2P_{3/2}$

Notation: $^{2S+1}L_J$, dvs $^2P_{3/2} \Rightarrow \begin{cases} S=1/2 \\ L=1 \\ J=3/2 \end{cases}$ (kvanttal)

Vet: $\vec{J}^2=\hbar^2 J(J+1)$, $\vec{L}^2=\hbar^2 L(L+1)$, $\vec{S}^2=\hbar^2 S(S+1)$ osv.



Använd cos-satsen: $\vec{S}^2=\vec{L}^2+\vec{J}^2-2|\vec{L}||\vec{J}|\cos\theta$

$$\Leftrightarrow \cos\theta=\frac{\vec{L}^2+\vec{J}^2-\vec{S}^2}{2|\vec{L}||\vec{J}|}=$$

$$=\frac{\hbar^2\left[L(L+1)+J(J+1)-S(S+1)\right]}{2\hbar^2\left[\sqrt{L(L+1)}\sqrt{J(J+1)}\right.}=\frac{1\cdot 2+3/2\cdot 5/2-1/2\cdot 3/2}{2\cdot\sqrt{1\cdot 2}\sqrt{3/2\cdot 5/2}}=$$

$$=\frac{5}{2\sqrt{15/2}}=\frac{5}{2}\sqrt{\frac{2}{15}}=\frac{5}{\sqrt{30}} \Rightarrow \underline{\underline{\theta=0{,}42=24^\circ}}$$

(Beteckning: Stora bokstäver för kvanttal som kan vara för <u>flera</u> partiklar)

XII 5 Atomer m. valens-e^- i s-tillst. utanför slutet skal befinner sig i homogent magnetfält m. flödestätheten 0,4 T.

Vi ska mha fotoner tillföra elektronerna så mycket energi att deras spinn vänds i "fel" riktning mot magnetfältet. OBS! Här: "spinn" betyder m_s, inte s! (För elektroner är ju alltid $s = 1/2 \Rightarrow m_s = \pm 1/2$). Villken våglängd ska ljuset ha?

Energi från magnetfältet: $E_B = g_j \mu_B B m_s = \pm \frac{1}{2} \cdot 2 \cdot B \cdot \mu_B$

$g_j = 2$, $m_s = \pm 1/2$

$$\Delta E_B = \left(+\frac{1}{2} 2 B \mu_B\right) - \left(-\frac{1}{2} 2 B \mu_B\right) = 2 B \mu_B$$

$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e}$

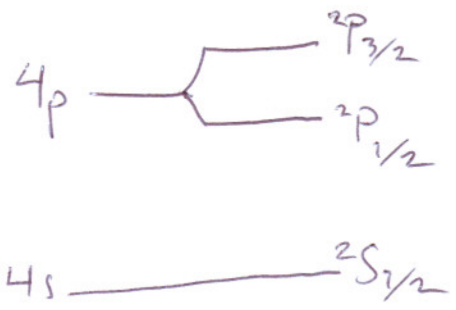
$$\lambda = \frac{hc}{\Delta E_B} = \frac{hc}{2B\mu_B} = \frac{hc}{2B} \frac{2m_e}{e\hbar} = \frac{2\pi c m_e}{e} \cdot \frac{1}{B} = 2,7 \text{ cm}$$

XII 11

Hyperfinstruktur: Koppling mellan elektronens och kärnans rörelsemängdsmoment. (Jfr finstrukturuppsplittring från koppling mellan elektronens ban- och spinnrörelsemängdsmoment.)

Atomkärnans rörelsem.mom. $\vec{I}$, $\vec{I}^2 = \hbar^2 I(I+1)$ kopplas till $\vec{J}$ genom $H_{hfs} = \frac{2\pi}{\hbar} A \vec{I} \cdot \vec{J}$, där A = hyperfinstrukturkonstant. ($[H] = E$, $[\hbar] = ET \Rightarrow [A] = T^{-1}$)

Betrakta följande system:



a) I hur många nivåer splittras de tre energinivåerna upp om $I = 3/2$?

b) Beräkna uppsplittringen om
$A(^2S_{1/2}) = 230{,}0$ MHz
$A(^2P_{1/2}) = 29{,}0$ MHz
$A(^2P_{3/2}) = 6{,}1$ MHz

Ledning: Inför $\vec{F} = \vec{I} + \vec{J}$, $\vec{F}^2 = \hbar^2 F(F+1)$, där

$F = |I-J|, |I-J|+1, \ldots, I+J$

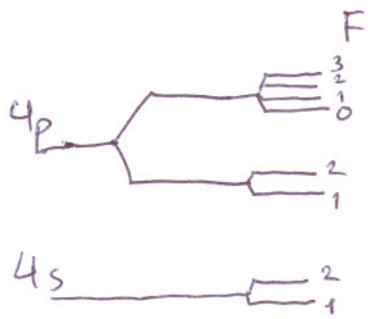
...

... a) $^2S_{1/2}$ & $^2P_{1/2}$: $J = 1/2 \Rightarrow |I-J| = 1, \; I+J = 2$

$\Rightarrow F = 1, 2$, dvs 2 nivåer

$^2P_{3/2}$: $J = 3/2 \Rightarrow |I-J| = 0, \; I+J = 3$

$\Rightarrow F = 0, 1, 2, 3$, dvs 4 nivåer



b) $\vec{F}^2 = \vec{I}^2 + \vec{J}^2 + 2\vec{I}\cdot\vec{J}$

$$\Rightarrow H_{hfs} = \frac{2\pi}{\hbar} A \vec{I}\cdot\vec{J} = \frac{\pi}{\hbar} A \left(\vec{F}^2 - \vec{I}^2 - \vec{J}^2\right)$$

$$= \pi A \hbar \left(F(F+1) - I(I+1) - J(J+1)\right)$$

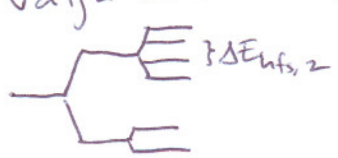
Mellan två hfs-nivåer är alltid I och J samma, dvs

$$\Delta E_{hfs} = \pi A \hbar \left[F_2(F_2+1) - (F_1(F_1+1)) + I(I+1) - I(I+1) + J(J+1) - J(J+1)\right]$$

$$= \pi A \hbar \left(F_2(F_2+1) - F_1(F_1+1)\right) =$$

$\hbar = 6{,}58 \cdot 10^{-16}$ eVs

Väljer dessa två ($F_2 = 2$, $F_1 = 1$ i båda fallen):



$$\Delta E_{hfs,2} = \pi A(^2P_{3/2})\hbar\,(2\cdot 3 - 1\cdot 2) = \pi \cdot 6{,}1 \cdot 10^{6} \cdot 6{,}58 \cdot 10^{-16} \cdot 4 \text{ eV}$$

$$= 50{,}4 \text{ neV}$$

$$\Delta E_{hfs,1} = \pi A(^2S_{1/2})\hbar \cdot 4 = 1{,}9 \; \mu\text{eV}$$

XIII 3

Väteatom i gr. tillstånd för $t \leq 0$

Vid $t > 0$: yttre störning som ger potential

$$V(\vec{r},t) = V_0 z\, e^{-t/\tau} \sin \omega \tau$$

Sökt: slh för 2p-tillst. efter lång tid.

Använd lägsta ordn. tidsber. störn. räkn. (fl. förk. i r.!)

2p: $n=2$, $l=1$, $m_l = -1, 0, 1$

$$\Rightarrow |C_{2p}(t)|^2 = |C_{21-1}(t)|^2 + |C_{210}(t)|^2 + |C_{211}(t)|^2$$

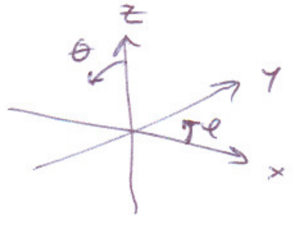
$$C_{2pm_l}(t) = -\frac{i}{\hbar}\int_0^t dt' \langle 2pm_l | V(\vec{r},t') | 1s \rangle e^{i\omega_{2p,1s} t'}$$

$$\psi_{100} = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-r/a_0}$$

Beräkna matriselement $\langle 2 1 m_l | V(\vec{r},t') | 100 \rangle =$

$$= \int dV \psi^*_{21m_l} V(\vec{r},t') \psi_{100}$$

Byt till polära koord.



$\theta \in [0, \pi]$

$\varphi \in [0, 2\pi]$

$r \in [0, \infty)$

$V(\vec{r},t) = V(z,t)$, dvs oberoende av x & y och därför

oberoende av φ! Men $\psi_{21,\pm 1} \propto Y_{1\pm 1} = e^{\pm i\varphi}$

ψ_{100} är också oberoende av φ.

...

... I matriselementet $\int dV\, \psi^*_{21\pm1} V(z,t)\, \psi_{100} =$

$$= \int dV\, \psi^*_{21\pm1} V(r,\theta,t)\, \psi_{100}$$

ingår därför integralen $\int_0^{\pi} d\varphi\, e^{\pm i\varphi} = 0$.

$$\Rightarrow |c_{21\pm1}(t)|^2 = 0$$

$$\Rightarrow |c_{2p}(t)|^2 = |c_{210}(t)|^2 = \left| -\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' \langle 210 | V(z,t') | 100 \rangle e^{i\omega_{2p,1s} t'} \right|^2$$

$$= \dots \xrightarrow[t\to\infty]{} \frac{2^{15}}{3^{10}} \frac{a_0^2 V_0^2}{\hbar^2} \frac{\omega^2}{(\omega_{2p,1s}^2 + 1/\tau^2 + \omega^2)^2}$$

~~[illegible]~~

~~[illegible]~~