

UNIVERSITETET I OSLO

Det matematisk-naturvitenskapelige fakultet

Eksamen i: FYS2140 Kvantefysikk

Eksamensdag: Onsdag 11. juni 2025

Tid for eksamen: Kl. 09.00–13.00 (4 timer)

Oppgavesettet er på: 4 sider

Tillatte hjelpemidler:

- Rottmann: 'Matematisk formelsamling'
- Øgrim og Lian: 'Fysiske størrelser og enheter'
- Angell og Lian: 'Fysiske størrelser og enheter'
- Godkjent kalkulator
- Ett A4 ark med egne notater (skrevet for hånd eller digitalt, begge sider av arket)

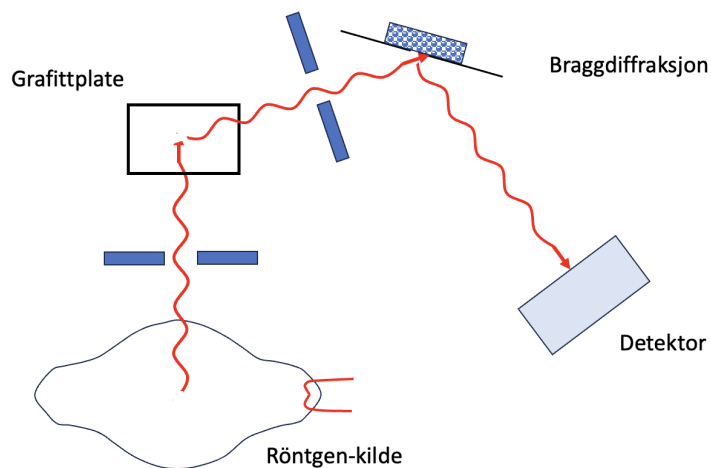
Løsningsforslag.

Maksimalt antall poeng totalt er 100. Maksimal poengsum man kan få per deloppgave står skrevet etter hver deloppgave.

Oppgave 1 Bruddet med klassisk fysikk

- a) Tegn en skisse av Compton-eksperimentet. På hvilken måte viser dette eksperimentet både lysets bølge- og partikkelegenskaper? [5p]

Svar: En skisse av oppsettet i Compton-eksperimentet er gitt i figur 1.



Figur 1: Prinsippskisse av Compton-eksperimentet.

I det første steget spres en røntgenstråle mot elektroner i en grafittplate. To spalter definerer hvilken vinkel θ den utgående strålen har i forhold til den innkommende strålen. Denne spredningen kan forklares hvis hver energikvant i lyset har bevegelsesmengde og kolliderer med et elektron på samme måte som en partikkel ville gjort. Lyset har altså *partikkeloppførsel* ved grafittplaten (og energikvantene i lyset er kjent som fotoner).

I det siste steget spres røntgenstrålen mot gitteret i en krystall med kjent avstand mellom krystallagene. Ifølge klassisk fysikk er lys elektromagnetiske bølger som kan interferere. Når lyset treffer krystallen skjer Bragg-diffraksjon som gir konstruktiv interferens for en viss vinkel mellom krystallens overflate og den innkommende strålen. Detektoren gir maksimalt utslag når konstruktiv interferens oppstår, og siden gitterkonstanten er kjent kan vi beregne bølgelengden til det spredte lyset. Lyset har altså *bølgeoppførsel* ved Bragg-krystallen.

- b) Forklar kort hvilken fysisk betydning vi legger til en bølgefunksjon $\Psi(x, t)$ i kvantemekanikken. Hvordan bryter konseptet om bølgefunksjonen med forventninger fra klassisk fysikk? [5p]

Svar:

Bølgefunksjonen Ψ har ingen direkte fysisk tolkning, ettersom den ikke kan måles. Derimot er det mulig å måle sannsynlighetstettheten $|\Psi|^2$ hvis vi preparerer flere partikler i samme initialtilstand og måler posisjonen til hver av partiklene. Ved flere målinger på likt preparerte partikler, kan vi finne sannsynlighetstettheten for partikkelens posisjon som beskrives av $|\Psi|^2$. Dobbeltpalteeksperimentet er et eksempel på hvordan man kan måle posisjonsfordelingen til kvantemekaniske objekter, som f.eks. fotoner og elektroner.

Dette bryter med oppfatningen av determinisme i klassisk fysikk; ved å bruke klassisk mekanikk kan man forutsi slutttilstanden til et klassisk objekt dersom man kjenner initialbetingelsene. I kvantemekanikken er det derimot kun en sannsynlighetsfordeling man kan forutsi, ikke konkrete utfall.

- c) Skriv ned den tidsavhengige Schrödinger-ligningen for en partikkel i én dimensjon med potensiell energi $V(x, t)$. Vis at løsninger på formen

$$\Psi(x, t) = \psi(x)e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \quad (1)$$

leder til den tidsuavhengige Schrödinger-ligningen.

Hva kalles slike løsninger, og hvilket krav må vi stille til $V(x, t)$ for at de skal gjelde? [5p]

Svar:

Den tidsavhengige Schrödinger-ligningen (TASL) er

$$\hat{H}\Psi = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}. \quad (2)$$

Dersom vi setter inn løsningen (1) på høyre side får vi

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = i\hbar \left(-\frac{i}{\hbar}E \right) \Psi = E\Psi,$$

slik at ligningen kan skrives som

$$\hat{H}\Psi = E\Psi, \quad (3)$$

som er den tidsuavhengige Schrödinger-ligningen (TUSL).

Løsninger på formen (1) kalles stasjonære tilstander. De gjelder dersom potensialet ikke avhenger av tid, altså når $V(x, t) = V(x)$.

- d) Forklar hva Zeeman-effekten er, og diskuter kort forskjellen mellom denne effekten og den effekten som får sølvatomer til å bøyes av i Stern-Gerlach-eksperimentet. [5p]

Svar: Zeeman-effekten er at et *homogent* magnetfelt hever degenerasjonen i energitilstandene til f.eks. et hydrogenatom. Dette skyldes ekstra ledd i Hamilton-operatoren av typen $\vec{B} \cdot \vec{L}$ og $\vec{B} \cdot \vec{S}$, som gir ulik energi for ulike magnetiske kvantetall m_l og m_s .

I Stern-Gerlach-eksperimentet blir sølvatomer sendt gjennom et *inhomogent* magnetfelt. Ethvert ladd angulærmoment er en magnetisk dipol som trekkes opp eller ned i et inhomogent magnetfelt, avhengig av dipolens komponent langs magnetfeltet. Sølvatomer har ett valenselektron i en s-orbital med kvantetall $l = 0$ og $m_l = 0$, og dermed null angulærmoment. Likevel bøyes sølvatomene av i det inhomogene magnetfeltet og treffer detektorskjermen bak i to punkter. For s-orbitaler med $m_l = 0$ forventer man bare ett punkt på detektoren, mens for eksiterte p-orbitaler med $m_l \in \{-1, 0, 1\}$ forventer man tre punkter. Siden detektoren viste to punkter indikerte resultatet at elektroner må ha enda et angulærmoment, senere kjent som *spinn*, med fast $s = 1/2$ og dermed $m_s \in \{-1/2, 1/2\}$.

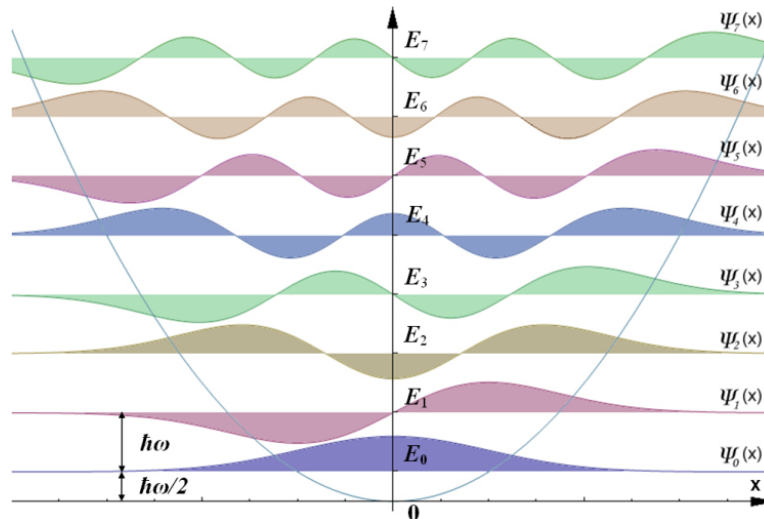
Forskjellen mellom Zeeman-effekten og Stern-Gerlach-effekten er altså at den første kun krever et homogent magnetfelt og resulterer i en *oppsplitting i energi* for partikler med ulikt magnetisk kvantetall, mens den andre krever et inhomogent magnetfelt og resulterer i en *avbøying av banen* til partikler med ulikt magnetisk kvantetall. Zeeman-effekten er en "statisk" effekt som påvirker selv stasjonære tilstander (med $\langle \vec{p} \rangle = \vec{0}$), mens Stern-Gerlach-effekten er en "dynamisk" effekt som kun påvirker spredningstilstander (der $\langle \vec{p} \rangle \neq \vec{0}$).

Oppgave 2 Harmonisk oscillator

Et elektron kan fanges i en *silisiumvakans*, et område i en silisiumkrystall der det mangler et atom. Nær bunnpunktet til det effektive potensialet som elektronet da opplever, kan potensialet tilnærmes som en harmonisk oscillator. Selv om Si-vakansen egentlig oppfører seg som en tredimensjonal oscillator, skal vi i denne oppgaven holde oss til én dimensjon.

- a) Tegn en skisse som viser potensialet $V(x)$ for en éndimensjonal harmonisk oscillator. Skissér også karakteristiske trekk ved bølgefunksjonene for grunntilstanden og den første eksiterte tilstanden. [5p]

Svar: Se ψ_0 og ψ_1 i figur 2.



Figur 2: Prinsippskisse av energitilstandene i en harmonisk oscillator (fra Wikipedia).

Her er vi ute etter at ψ_0 er symmetrisk og ψ_1 er antisymmetrisk om $x = 0$. I tillegg har grunntilstanden ingen noder (/nullpunkter), mens den første eksiterte tilstanden har én node. Man kan også merke seg at bølgefunksjonene strekker seg et stykke inn i potensialbarrierene på hver side, i kontrast til f.eks. en partikkel i en uendelig brønn. Figuren viser også at energigapet mellom påfølgende energinivåer i en harmonisk oscillator alltid er det samme, $\hbar\omega$.

- b) Bølgefunksjonen for grunntilstanden til et elektron fanget i en éndimensjonal Si-vakans er gitt ved

$$\psi_0(x) = A \exp \left[-\frac{1}{2} a^2 x^2 \right],$$

der A og a er konstanter.

Sett opp energi-egenverdligningen for denne bølgefunksjonen og bestem potensialet $V(x)$ som gir $\psi_0(x)$ som løsning. Finn også grunntilstandsenergien E_0 . Hva er sammenhengen mellom konstanten a og krumningen $V''(0)$ i bunnpunktet til potensialet? [5p]

Svar:

Energi-eigenverdiligningen (TUSL) er

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi_0}{dx^2} + V(x)\psi_0 = E_0\psi_0.$$

Vi setter inn uttrykket for ψ_0 og får at

$$\begin{aligned} \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} A \exp\left[-\frac{1}{2}a^2x^2\right] + V(x)A \exp\left[-\frac{1}{2}a^2x^2\right] &= E_0A \exp\left[-\frac{1}{2}a^2x^2\right], \\ \frac{-\hbar^2}{2m}(-a^2 + a^4x^2) \exp\left[-\frac{1}{2}a^2x^2\right] + V(x) \exp\left[-\frac{1}{2}a^2x^2\right] &= E_0 \exp\left[-\frac{1}{2}a^2x^2\right] \\ \frac{-\hbar^2}{2m}(-a^2 + a^4x^2) + V(x) &= E_0. \end{aligned}$$

For at denne siste ligningen skal gjelde for alle x , må

$$V(x) = \frac{\hbar^2 a^4}{2m} x^2, \quad (4)$$

som vi gjenkjenner som et HO-potensial med frekvens $\omega = \hbar a^2/m$. Grunntilstandsenergien blir følgelig

$$E_0 = \frac{\hbar^2 a^2}{2m} \quad (5)$$

(altså $\hbar\omega/2$ uttrykt ved HO-frekvensen).

Krumningen til HO-potensialet er

$$V''(x) = \frac{d^2}{dx^2} \left[\frac{\hbar^2 a^4}{2m} x^2 \right] = \frac{\hbar^2 a^4}{m}, \quad (6)$$

så den er konstant og proporsjonal med a^4 . (Krumningen er også direkte knyttet til HO-frekvensen ved at $V''(x) = m\omega^2$. Merk at et HO-potensial alltid har konstant krumning.) I en ekte Si-vakans er det krumningen i bunnpunktet av det effektive potensialet som kan måles (feks ved å måle energigapet $\hbar\omega = \hbar\sqrt{V''(0)/m}$ opp til første eksiterte tilstand), og konstanten a , som gir formen på den effektive grunntilstanden ψ_0 , kan så bestemmes fra (6).

- c) Normering av grunntilstanden $\psi_0(x)$ gir $A = \sqrt[4]{a^2/\pi}$. Bruk dette til å beregne $\langle x \rangle$, $\langle p \rangle$, $\langle x^2 \rangle$ og $\langle p^2 \rangle$ for grunntilstanden. Finn også $\sigma_x \sigma_p$, og kommenter resultatet. [10p]

Svar:

Generelt har vi at forventningsverdien til en observabel Q i én dimensjon er gitt av integralet

$$\langle Q \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \hat{Q} \Psi dx, \quad (7)$$

der ψ er bølgefunksjonen og $\hat{Q}$ er den tilsvarende operatoren. Siden den oppgitte grunntilstanden ψ_0 er symmetrisk om $x = 0$ kan vi bruke symmetriargumenter til å forenkle de følgende beregningene.

For $\langle x \rangle$ er integranden i (7) antisymmetrisk, så

$$\langle x \rangle = 0. \quad (8)$$

Denne forventningsverdien er tidsuavhengig, så det følger ved Ehrenfests teorem at

$$\langle p \rangle = m \frac{d \langle x \rangle}{dt} = 0. \quad (9)$$

For $\langle x^2 \rangle$ er integranden i (7) symmetrisk, så vi kan doble den og integrere fra 0 til ∞ ,

$$\begin{aligned} \langle x^2 \rangle &= |A|^2 \int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-a^2 x^2} dx \\ &= 2|A|^2 \int_0^{\infty} x^2 e^{-a^2 x^2} dx. \end{aligned} \quad (10)$$

Vi bruker integralet

$$\int_0^{\infty} x^k e^{-\lambda x^2} dx = \frac{1}{2} \lambda^{-\frac{k+1}{2}} \Gamma \left[\frac{k+1}{2} \right] \quad (11)$$

fra Rottmann og får

$$\begin{aligned} \langle x^2 \rangle &= |A|^2 a^{-3} \Gamma \left[\frac{3}{2} \right] \\ &= \sqrt{\frac{a^2}{\pi}} a^{-3} \frac{\sqrt{\pi}}{2} = \frac{1}{2a^2}. \end{aligned} \quad (12)$$

Forventningverdien til p^2 blir

$$\begin{aligned}
 \langle p^2 \rangle &= |A|^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{1}{2}a^2x^2} \left(-\hbar^2 \frac{d^2}{dx^2} \right) e^{-\frac{1}{2}a^2x^2} dx \\
 &= -\hbar^2 |A|^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{1}{2}a^2x^2} (-a^2 + a^4x^2) e^{-\frac{1}{2}a^2x^2} dx \\
 &= 2\hbar^2 a^2 |A|^2 \int_0^{\infty} (1 - a^2x^2) e^{-a^2x^2} dx \\
 &= \hbar^2 a^2 \sqrt{\frac{a^2}{\pi}} \left(a^{-1} \sqrt{\pi} - a^2 a^{-3} \frac{\sqrt{\pi}}{2} \right) = \frac{\hbar^2 a^2}{2}, \quad (13)
 \end{aligned}$$

der vi igjen brukte at integranden er symmetrisk samt integralet (11).

Uskarpshetsproduktet $\sigma_x \sigma_p$ blir altså

$$\sigma_x \sigma_p = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2} \sqrt{\langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2} \quad (14)$$

$$= \sqrt{\frac{1}{2a^2} \frac{\hbar^2 a^2}{2}} = \frac{\hbar}{2}, \quad (15)$$

så tilstanden ψ_0 ligger på uskarpshetsgrensen, med så samtidig skarp posisjon og bevegelsesmengde som mulig.

d) Anta at elektronet ved tiden $t = 0$ er i tilstanden gitt ved

$$\Psi(x, 0) = \begin{cases} B \sin^2 [\pi x/b] & \text{for } x \in [-b, b], \\ 0 & \text{ellers.} \end{cases}$$

Sett opp uttrykket for sannsynligheten for å måle energien E_0 ved tiden $t = 0$. [5p]

Hint: Du trenger ikke integrere noe, bare sette opp uttrykket.

Svar:

Hvis vi skriver bølgefunksjonen som en superposisjon av energi-eigentilstander,

$$\Psi(x, 0) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \psi_n(x), \quad (16)$$

er sannsynligheten for å måle hver energi E_n gitt av koeffisienten c_n ved at

$$P_n = |c_n|^2. \quad (17)$$

Siden energi-eigentilstandene er ortonormale kan vi finne en koeffisient ved Fouriers triks,

$$c_n = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*(x) \Psi(x, 0) dx. \quad (18)$$

I vårt tilfelle blir altså uttrykket for sannsynligheten

$$\begin{aligned} P_0 &= \left| \int_{-\infty}^{\infty} \psi_0^*(x) \Psi(x, 0) dx \right|^2 \\ &= \left| AB \int_{-b}^b \exp \left[-\frac{1}{2} a^2 x^2 \right] \sin^2 [\pi x/b] dx \right|^2. \end{aligned} \quad (19)$$

Oppgave 3 Hydrogenatomet

Energi-eigenverdligningen for et elektron i et hydrogenatom er

$$\hat{H}_0 \psi_{nlm_l} = -\frac{E_0}{n^2} \psi_{nlm_l},$$

der E_0 er en konstant. Vi ser i denne oppgaven bort fra elektronets egenspin.

- a) Hvilke verdier kan kvantetallene n , l og m_l ha?
Hva er deres fysiske betydning? [5p]

Svar:

Hovedkvantetallet n kan ha alle positive heltallsverdier og bestemmer totalenergien ved at $E_n = -E_0/n^2$. Kvantetallet l kan ha heltallige verdier fra 0 til $(n-1)$ og bestemmer totalt angulærmoment ved at $L^2 = \hbar^2 l(l+1)$. Det magnetiske kvantetallet m_l kan ha verdier i heltallige trinn fra $-l$ til $+l$ og er knyttet til z -komponenten av angulærmomentet ved at $L_z = \hbar m_l$.

- b) Anta at elektronet er i superposisjonstilstanden

$$\Psi(\vec{r}, t) = \sqrt{\frac{1}{3}} \psi_{100}(\vec{r}) e^{-\frac{i}{\hbar} E_1 t} + \sqrt{\frac{2}{3}} \psi_{311}(\vec{r}) e^{-\frac{i}{\hbar} E_3 t}.$$

Hva kan du si om resultatet av en energimåling?

Hva er $\langle H \rangle$ og σ_H for denne superposisjonstilstanden? [5p]

Svar:

En energimåling vil gi enten $E_1 = -E_0$ eller $E_3 = -E_0/9$ med sannsynligheter gitt ved $P_1 = |c_1|^2 = \frac{1}{3}$ og $P_3 = |c_3|^2 = \frac{2}{3}$. Her er $E_0 \approx 13.6$ eV.

For å finne $\langle H \rangle$ og σ_H husker vi at $(e^{-iE_1 t/\hbar})^* e^{-iE_1 t/\hbar} = e^0 = 1$ og at

egentilstandene ψ_{nlm_l} er ortonormale. Derfor får vi

$$\begin{aligned}\langle H \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(\vec{r}, t) \hat{H} \Psi(\vec{r}, t) d^3r \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{1}{3} \psi_{100}^* E_1 \psi_{100} + \frac{2}{3} \psi_{311}^* E_3 \psi_{311} \right) d^3r \\ &= \frac{1}{3} E_1 + \frac{2}{3} E_3\end{aligned}\quad (20)$$

$$= -\frac{1}{3} E_0 - \frac{2}{3} \frac{E_0}{9} = -\frac{11}{27} E_0. \quad (21)$$

Videre trenger vi $\langle H^2 \rangle$ for å finne σ_H . Her får vi tilsvarende

$$\begin{aligned}\langle H^2 \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(\vec{r}, t) \hat{H}^2 \Psi(\vec{r}, t) d^3r \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{1}{3} \psi_{100}^* E_1^2 \psi_{100} + \frac{2}{3} \psi_{311}^* E_3^2 \psi_{311} \right) d^3r \\ &= \frac{1}{3} E_1^2 + \frac{2}{3} E_3^2\end{aligned}\quad (22)$$

$$= \frac{1}{3} E_0^2 + \frac{2}{3} \frac{E_0^2}{9^2} = \frac{83}{243} E_0^2. \quad (23)$$

Det følger at

$$\sigma_H = \sqrt{\langle H^2 \rangle - \langle H \rangle^2} \quad (24)$$

$$\begin{aligned}&= \sqrt{\frac{83}{243} - \frac{11^2}{27^2}} E_0 \\ &= \sqrt{\frac{128}{729}} E_0 = \frac{8\sqrt{2}}{27} E_0 \approx 0.42 E_0.\end{aligned}\quad (25)$$

- c) Bølgefunksjonen for s -tilstanden med $n = 2$ (altså $2s$ -orbitalen) er gitt ved

$$\psi_{200} = \sqrt{\frac{1}{8\pi a_0^3}} \left(1 - \frac{\rho}{2} \right) \exp \left[-\frac{\rho}{2} \right],$$

der $\rho = r/a_0$ og a_0 er Bohr-radien. Vis at denne bølgefunksjonen er normert. Finn både forventningsverdien for radien $\langle r \rangle$ og den radien som elektronet med størst sannsynlighet befinner seg i. Forklar kort hvorfor det er forskjell på disse to radiene. [10p]

Hint: Det kan være nyttig å bruke at

$$\int_0^{\infty} \rho^k e^{-\rho} d\rho = k! \quad (26)$$

for alle positive heltall k .

Svar:

Normintegralet er

$$\begin{aligned}
 \iiint |\psi_{200}|^2 d^3r &= \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} |\psi_{200}|^2 r^2 \sin \theta dr d\theta d\phi & (27) \\
 &= \frac{1}{8\pi a_0^3} \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \left(1 - \frac{\rho}{2}\right)^2 e^{-\rho} r^2 \sin \theta dr d\theta d\phi \\
 &= \frac{4\pi}{8\pi a_0^3} \int_0^\infty \left(1 - \frac{\rho}{2}\right)^2 e^{-\rho} r^2 dr \\
 &= \frac{1}{2a_0^3} \int_0^\infty \left(1 - \rho + \frac{\rho^2}{4}\right) e^{-\rho} a_0^2 \rho^2 a_0 d\rho \\
 &= \frac{1}{2} \int_0^\infty \left(\rho^2 - \rho^3 + \frac{\rho^4}{4}\right) e^{-\rho} d\rho \\
 &= \frac{1}{2} \left(2! - 3! + \frac{4!}{4}\right) \\
 &= \frac{1}{2} (2 - 6 + 6) = 1. & (28)
 \end{aligned}$$

Her brukte vi at bølgefunksjonen ikke avhenger av vinklene θ og ϕ , så de kan integreres ut ved $\iint \sin \theta d\theta d\phi = 4\pi$. Vi byttet også variabel til ρ ved at $r = a_0 \rho$ og brukte det oppgitte integralet.

Forventningsverdien for radien er

$$\begin{aligned}
 \langle r \rangle &= \iiint \psi_{200}^* r \psi_{200} d^3r & (29) \\
 &= \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \psi_{200}^* r \psi_{200} r^2 \sin \theta dr d\theta d\phi \\
 &= 4\pi \int_0^\infty r^2 |\psi_{200}|^2 r dr & (30) \\
 &= \frac{a_0}{2} \int_0^\infty \rho^2 \left(1 - \rho^2 + \frac{\rho^2}{4}\right) e^{-\rho} \rho d\rho \\
 &= \frac{a_0}{2} \int_0^\infty \left(\rho^3 - \rho^4 + \frac{\rho^5}{4}\right) e^{-\rho} d\rho \\
 &= \frac{a_0}{2} \left(3! - 4! + \frac{5!}{4}\right) \\
 &= \frac{a_0}{2} (6 - 24 + 30) = 6a_0, & (31)
 \end{aligned}$$

der vi igjen integrerte ut vinklene og brukte det oppgitte integralet.

Fra linje 3 ser vi at den radielle sannsynlighetstettheten er

$$P(r) = 4\pi r^2 |\psi_{200}|^2 \quad (32)$$

$$\begin{aligned} &= \frac{1}{2a_0^3} r^2 \left(1 - \frac{\rho}{2}\right)^2 e^{-\rho} \\ &= \frac{1}{2a_0} \left(r/a_0 - \frac{r^2}{2a_0^2}\right)^2 e^{-r/a_0}. \end{aligned} \quad (33)$$

Den mest sannsynlige radien finner vi ved toppunktet til denne sannsynlighetstettheten, altså der

$$\begin{aligned} \frac{dP}{dr} &= 0 \\ \frac{1}{2a_0} \left(2 \left(r/a_0 - \frac{r^2}{2a_0^2}\right) (1/a_0 - r/a_0^2) - \frac{1}{a_0} \left(r/a_0 - \frac{r^2}{2a_0^2}\right)^2\right) e^{-r/a_0} &= 0 \\ \left(r/a_0 - \frac{r^2}{2a_0^2}\right) \left(2(1/a_0 - r/a_0^2) - \frac{1}{a_0} \left(r/a_0 - \frac{r^2}{2a_0^2}\right)\right) &= 0 \\ (r/a_0) \left(1 - \frac{r}{2a_0}\right) \left(2 - 3r/a_0 + \frac{r^2}{2a_0^2}\right) &= 0 \\ r(2 - r/a_0)(4 - 6r/a_0 + (r/a_0)^2) &= 0. \end{aligned} \quad (34)$$

Dette gir løsninger $r_1 = 0$, $r_2 = 2a_0$, $r_3 = (3 - \sqrt{5})a_0 \approx 0.76a_0$ og $r_4 = (3 + \sqrt{5})a_0 \approx 5.24a_0$. Innsatt i uttrykket (33) for $P(r)$ gir disse henholdsvis

$$\begin{aligned} P(0) &= 0, \\ P(2a_0) &= 0, \\ P(0.76a_0) &= \frac{1}{2a_0} (0.76 - 0.76^2/2)^2 e^{-0.76} \approx 0.10/2a_0, \\ P(5.24a_0) &= \frac{1}{2a_0} (5.24 - 5.24^2/2)^2 e^{-5.24} \approx 0.38/2a_0. \end{aligned}$$

Radien som elektronet med størst sannsynlighet befinner seg i er altså $r = (3 + \sqrt{5})a_0 \approx 5.24a_0$. Det er forskjell på denne radien og den forventede radien $\langle r \rangle$ fordi den radielle sannsynlighetsfordelingen $P(r)$ er spredt ut, med potensielt stor akkumulert sannsynlighet i andre områder som trekker snittet vekk fra der sannsynligheten er høyest. Forventningsverdien er sjelden det samme som den mest sannsynlige verdien.

d) Anta nå at Hamilton-operatoren har et ekstra ledd

$$\hat{H}_1 = \frac{E_0}{16\hbar^2} (\hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2).$$

Finn egenverdiene for $\hat{H}_0 + \hat{H}_1$. Skissér energinivåene med $n = 1$ og $n = 2$ før og etter at $\hat{H}_1$ -leddet er innført. Hvilken degenerasjon har disse nivåene i de to tilfellene? [10p]

Svar:

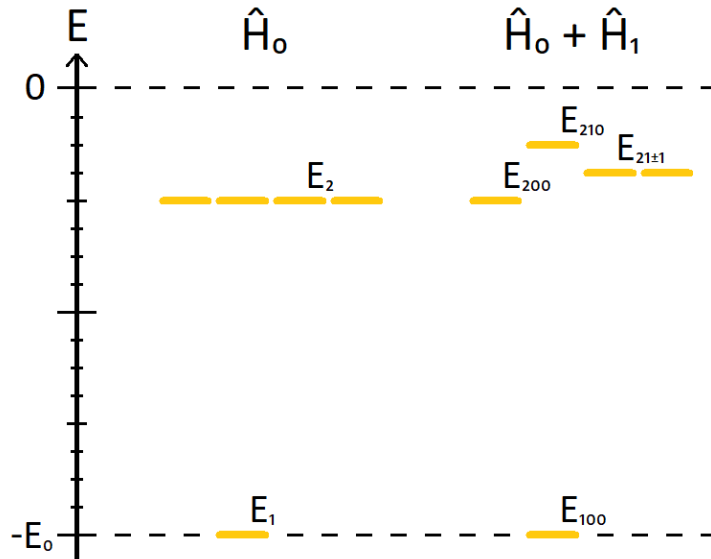
Vi ønsker å finne egenverdiene til Hamilton-operatoren $\hat{H}_0 + \hat{H}_1$, og merker oss at

$$\hat{H}_1 = \frac{E_0}{16\hbar^2}(\hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2) = \frac{E_0}{16\hbar^2}(\hat{L}^2 - \hat{L}_z^2). \quad (35)$$

Egentilstandene ψ_{nlm_l} til $\hat{H}_0$ er følgelig også egentilstander til $\hat{H}_0 + \hat{H}_1$, med egenverdier

$$E_{nlm_l} = -E_0/n^2 + \frac{E_0}{16}(l(l+1) - m_l^2). \quad (36)$$

Energinivåene for $n = 1$ og $n = 2$ er skissert i figur 3.



Figur 3: Energinivåer i et hydrogenatom før og etter innføring av $\hat{H}_1 = \frac{E_0}{16\hbar^2}(\hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2)$.

$n = 1$ gir ett energinivå med $l = 0$ og $m_l = 0$ som har samme energi $-E_0$ før og etter at $\hat{H}_1$ er innført. $n = 2$ gir derimot fire energinivåer, ett med $l = 0$ og $m_l = 0$ og tre med $l = 1$ og $m_l \in \{-1, 0, 1\}$. Disse er degenererte med samme energi $-E_0/4$ før $\hat{H}_1$ blir innført, men splitter i tre ulike energier når $\hat{H}_1$ innføres: nivået med $l = 0$ beholder energien $-E_0/4$, nivået med $l = 1$ og $m_l = 0$ forskyves til $-E_0/4 + E_0/8$ mens nivåene med $l = 1$ og $m_l = \pm 1$ forskyves til $-E_0/4 + E_0/16$.

Oppgave 4 Flerpartikkel-systemer

- a) Vi betegner spinn-egentilstandene for partikler med spinn-1/2 (det vil si spinn-quantetall $s = \frac{1}{2}$) med χ_+ og χ_- , altså

$$\begin{aligned}\hat{S}_z \chi_+ &= +\frac{\hbar}{2} \chi_+, \\ \hat{S}_z \chi_- &= -\frac{\hbar}{2} \chi_-.\end{aligned}$$

Skriv ned topartikkel-tilstandene for *to* slike spinn med total magnetisk quantetall $m_s = 0$. Hva kalles disse tilstandene, og hvilken observabel kan du måle for å skille dem? [5p]

Hint: Dette vil si topartikkel-egentilstandene for $\hat{S}_z^{(1)} + \hat{S}_z^{(2)}$ med egenverdi $\hbar m_s = 0$.

Svar:

To spinn-1/2-partikler kan ha totalspinn $s = (1/2 - 1/2) = 0$ eller $s = (1/2 + 1/2) = 1$. I det første tilfellet er kun $m_s = 0$ mulig, mens i det andre tilfellet kan m_s være -1 , 0 eller 1 . Dermed er det to mulige tilstander med $m_s = 0$, en singlett-tilstand

$$\chi_{00} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\chi_+^{(1)} \chi_-^{(2)} - \chi_-^{(1)} \chi_+^{(2)}) \quad (37)$$

og en triplett-tilstand

$$\chi_{10} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\chi_+^{(1)} \chi_-^{(2)} + \chi_-^{(1)} \chi_+^{(2)}). \quad (38)$$

(Disse kan også noteres med Dirac-notasjon,

$$\chi_{00} = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle), \quad (39)$$

$$\chi_{10} = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle), \quad (40)$$

der $\uparrow$ betegner χ_+ og $\downarrow$ betegner χ_- .) Singlett-tilstanden har totalspinn $S^2 = 0$, mens triplett-tilstanden har totalspinn $S^2 = 2\hbar^2$. Vi kan altså måle totalspinnet til de to elektronene for å skille tilstandene fra hverandre.

- b) Vis at en antisymmetrisk topartikkel-bølgefunksjon kan skrives på formen

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2!}} \begin{vmatrix} \psi_a(\vec{r}_1) & \psi_a(\vec{r}_2) \\ \psi_b(\vec{r}_1) & \psi_b(\vec{r}_2) \end{vmatrix},$$

der de vertikale strekene betegner determinanten til 2×2 -matrisen innenfor. [5p]

Svar:

En antisymmetrisk topartikkel-bølgefunksjon kan skrives på formen

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_a(\vec{r}_1)\psi_b(\vec{r}_2) - \psi_b(\vec{r}_1)\psi_a(\vec{r}_2)), \quad (41)$$

som er normalisert så lenge énpartikkel-bølgefunksjonene ψ_a og ψ_b er ortonormale. Når man skriver ut den oppgitte determinanten får man nettopp dette uttrykket.

- c) Heliumatomet (He) og hydrogenmolekylet (H_2) er to eksempler på topartikkel-systemer i naturen, dersom vi anser kjernene som stasjonære punktladninger som kun setter opp potensialet elektronene beveger seg i.

Forklar kort hvorfor de to bindingselektronene i H_2 -molekylet må være i en spinn-singlett-tilstand.

Hva er mest energetisk fordelaktig for de to elektronene i den første eksiterte tilstanden i He-atomet — en spinn-singlett-tilstand eller en spinn-triplett-tilstand? Diskuter kort. [10p]

Svar:

For at H_2 -molekylet skal være stabilt må de to elektronene befinne seg mellom kjernene for å holde dem sammen. Dette skjer når elektronene er i samme romlig symmetriske tilstand (en såkalt *bindingstilstand/bonding state*), og siden romdelen av toelektron-tilstanden da er symmetrisk ved partikkelbytte må spinndelen være antisymmetrisk, altså en spinn-singlett.

I heliumatomet, derimot, er det ingen energetisk fordel av at de to elektronene er nærme hverandre, da det ikke er to kjerner å skjærme for. I stedet er det energetisk fordelaktig å ha de to elektronene lenger unna hverandre for å redusere Coulomb-energien fra frastøtning. For grunntilstanden til helium er begge elektroner i samme romlige tilstand (1s), så der må spinnet igjen være i en singlett-tilstand, men for første eksiterte tilstand er elektronene i forskjellige tilstander (1s og 2s). Partikler i forskjellige romlige tilstander er generelt nærmere hverandre når topartikkel-bølgefunksjonen er symmetrisk ved partikkelbytte og lenger unna hverandre når den er antisymmetrisk (såkalt *utvekslingskraft/exchange force*). For første eksiterte tilstand i heliumatomet er det altså mest energetisk fordelaktig at toelektron-tilstanden har antisymmetrisk romdel og dermed symmetrisk spinndel, altså en spinn-

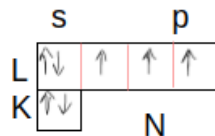
triplett.

- d) Tegn opp elektronkonfigurasjonen til et nitrogenatom i grunntilstanden. Forklar kort resonneret ditt for fordelingen av elektroner i ulike orbitaler. [5p]

Hint: Nitrogen har atomnummer 7.

Svar:

Figur 4 viser elektronstrukturen i nitrogenatomet.



Figur 4: Elektronstruktur til et nitrogenatom i grunntilstanden.

K betegner $n = 1$ og L betegner $n = 2$ i figuren. Vi har brukt følgende utvalgsregler:

1. Orbitaler med lavere n fylles først for å minimere energi. Derfor fylles K-skallet opp først.
2. Etter Paulis eksklusjonsprinsipp kan ikke to fermioner ha samme tilstand, så de to elektronene i 1s-orbitalen må være i en singlett-tilstand med motsatte spinn.
3. Neste steg er å fylle opp L-skallet. Her fylles orbitaler med lavere l først ettersom disse skjermes mindre av elektronene innenfor. Dermed fylles 2s-orbitalen opp før 2p-orbitalene.
4. Nå har vi 3 elektroner igjen å fylle i 2p-orbitalene. Etter Hunds regel må disse være i en tripplett-tilstand med parallelle spinn fordi en symmetrisk spinn-tilstand gir en antisymmetrisk romlig bølgefunksjon med større avstand mellom elektronene og dermed mindre Coulomb-energi fra frastøtning.